

Resum

El projecte que es presenta té com a principal objectiu presentar un model per al transport de triti d'un canal d'un embolcall regenerador (embolcall tritigeni) d'un reactor de fusió D-T. El model pot ser una eina molt útil de disseny, a més de contribuir en el desenvolupament de l'únic software de transport de matèria oficial per a ITER. El projecte ITER és un projecte tecnològic de caràcter internacional que té com objectiu desenvolupar un reactor de fusió autosuficient, que serà la base dels posteriors dissenys comercials.

Aquest projecte s'emmarca dins el programa Consolider Tecnofus, coordinat pel Laboratori Nacional de Fusió Ciemat. Gràcies a la col·laboració amb el Ciemat s'ha tingut accés a l'únic software oficial per a ITER. El software oficial és TMAP7 i s'utilitza en les simulacions realitzades en aquest projecte.

El projecte es centra en el disseny d'embolcall tritigeni *Test Blanket Module (TBM) Helium Cooled Lead Lithium (HCLL)*, un dels dos dissenys de TBM que s'estan desenvolupant a la Unió Europea. El Grup d'Estudis Termohidràulics de la Secció d'Enginyeria Nuclear ha col·laborat amb el Ciemat desenvolupant eines de càlcul per aquest disseny.

En el projecte es presenten dos models. Un primer cas de geometria simple, amb hidrogen i deuteri. Aquest model servirà per a la validació. El segon cas que es presenta és un model més complex que reproduïx la geometria i la generació de triti del HCLL.

Els resultats obtinguts en les simulacions són d'utilitat per a la comprensió dels fenòmens que tenen lloc en els sistemes modelats i també per al comportament del codi.

En les simulacions realitzades del canal del HCLL es pot observar l'evolució de la concentració de triti al llarg del canal de plom-liti i en el circuit refrigerant d'heli. S'observa que en el canal de plom-liti la concentració augmenta fins arribar a un màxim (en la zona més propera a la primera paret), a partir del qual disminueix. En el circuit d'heli la concentració augmenta al llarg del recorregut. A més a més, s'ha posat de manifest el fenomen de "back permeation" o flux de retorn, és a dir, l'aparició d'un flux de triti entrant des del canal d'heli cap al canal de plom-liti.

Dels valors obtinguts es calcula una eficiència de permeació del 3.05% i 3.75%.

El model del transport de triti en un canal del TBM-HCLL implementat constitueix un model base sobre el qual es podrà seguir treballant per a desenvolupar models més complexos.





Sumari

RESUM	1
SUMARI	3
GLOSSARI	5
1. PREFACI	7
1.1. Origen del projecte.....	7
1.2. Requeriments previs.....	8
2. INTRODUCCIÓ	9
2.1. Objectius del projecte	9
2.2. Abast del projecte.....	9
3. EMBOLCALL TRITIGENI TBM	11
3.1. INTRODUCCIÓ.....	11
3.2. L'EMBOCALL TRITIGENI.....	12
3.3. DISSENY HCLL.....	13
3.4. SIMULACIÓ DEL TRANSPORT DE TRITI.....	15
4. TMAP7	17
4.1. INTRODUCCIÓ.....	17
4.2. MODEL DE TRANSPORT	17
4.2.1. Transport a través de les superfícies	18
4.2.2. Difusió a través d'estructures.....	21
4.2.3. Evolució dels recintes.....	22
4.3. MÈTODE NUMÈRIC	25
4.4. ESTRUCTURA D'UN ARXIU D'ENTRADA O <i>INPUT</i>	26
4.4.1. Dades inicials (Title input, Main Input).....	28
4.4.2. Dades de recinte (Enclosure Input).....	28
4.4.3. Dades tèrmiques (Thermal Input)	30
4.4.4. Dades de difusió (Diffusion Input)	30
4.4.5. Equacions definides per l'usuari (Equation Input)	31
4.4.6. Taules definides per l'usuari (Table Input).....	32
4.4.7. Dades de control (Control Input)	32
4.4.8. Dades de gràfics (Plot Input).....	32
5. APLICACIONS PRÀCTIQUES	33
5.1. CAS 1: EXPERIMENT FUKADA.....	34



5.1.1.	Definició del cas	34
5.1.2.	Configuració A	35
5.1.3.	Configuració B.....	39
5.1.4.	Configuració C.....	42
5.2.	CAS 2: CANAL DE PLOM-LITI HCLL	49
5.2.1.	Definició del cas	49
5.2.2.	Descripció del model	50
5.2.3.	Resultats.....	54
6.	ANÀLISI DE COSTOS _____	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
7.	ESTUDI D'IMPACTE AMBIENTAL _____	63
8.	CONCLUSIONS _____	65
	AGRAÏMENTS _____	67
	BIBLIOGRAFIA _____	69



Glossari

BU: Unitat reproductora (breeder unit)

CFD: Computational Fluid Dynamics

Ciemat: Centro de Investigaciones Energéticas Medioambientales y Tecnológicas

CP: Placa refrigerant (cooling plate)

D: difusivitat

DEMO: Demonstration Power Plant

D-T: deuteri-triti

EU: aleació metàl·lica Eurofer

FW: Primera paret (first wall)

HCLL: Helium Cooled Lead-Lithium

ITER: International Thermonuclear Experimental Reactor

k_d : constant de dissociació molecular

k_r : constant de recombinació molecular

k_s : constant de Sievert

SP: Placa estructural (stiffening plate)

TBM: Embolcall tritigeni (Test Blanket Module)





1. Prefaci

1.1. Origen del projecte

En l'actual marc energètic mundial hi ha la necessitat de desenvolupar noves fonts energètiques que puguin fer front a la demanda en un futur. En aquest context s'està investigant en el desenvolupament de l'energia de fusió nuclear. El projecte ITER, el qual encara es troba en la fase de desenvolupament, constituirà la prova experimental on s'estudia la viabilitat tecnològica de la fusió.

Entre els components més sofisticats que es provaran a ITER hi ha diferents dissenys d'embolcall tritigeni (Test Blanket Modules, TBM); es tracta de mòduls que s'implementaran a ITER per estudiar-ne el comportament. A la Unió Europea s'estan desenvolupant dos dissenys de TBM, el HCLL (Helium Cooled Lithium.lead) i el HCPB (Helium Cooled Peeble Bed).

El Grup d'Estudis Termohidràulics de la Secció d'Enginyeria Nuclear participa en el desenvolupament d'eines numèriques que permetin simular els fenòmens que tenen lloc en el disseny HCLL i el seu comportament. En aquest sentit, disposar de models fiables és una eina molt útil de disseny. Tenint en compte que TMAP7 [6] és l'únic software oficial per a ITER i que actualment hi ha molt poca bibliografia al respecte i no es disposa de models validats de l'embolcall tritigeni, resulta de gran interès desenvolupar un model que podria resultar d'ajuda en el disseny de l'embolcall.

Actualment, la UPC participa en diferents àmbits en el projecte Consolider TecnoFus, liderat pel Ciemat. Les activitats que es realitzen en el programa TecnoFus estan enfocades al desenvolupament d'un concepte d'embolcall tritigeni i els seus sistemes auxiliars "de planta". TecnoFus està coordinat pel Laboratori Nacional de Fusió del Ciemat, que actua com a Entitat Gestora.

Aquest projecte final de carrera, doncs, es realitza en col·laboració amb el Ciemat, que posseeix una llicència del Codi TMAP7.



1.2. Requeriments previs

Per a la realització d'aquest projecte es necessari el coneixement de conceptes basics de física nuclear, de transport de matèria i de reactors de fusió nuclear.

Per altra banda, també és necessari cert domini del software que s'utilitzarà per a realitzar les simulacions, TMAP7.



2. Introducció

2.1. Objectius del projecte

L'objectiu del projecte és desenvolupar un model en TMAP7 que reproduïxi la geometria del HCLL, incloent-hi la generació de triti corresponent. Es comença modelant un cas base de geometria simple que servirà per a la validació.

El Grup d'Estudis Termohidràulics de la Secció d'Enginyeria Nuclear no compta amb textos ni treballs realitzats amb TMAP7. De manera que aquest projecte també pretén ser un text introductori de referència per als estudiants que realitzin futurs projectes amb TMAP7, ja que s'hi inclou una descripció del programa i del desenvolupament dels models.

2.2. Abast del projecte

En aquest projecte es desenvolupa un model simplificat de l'embolcall regenerador (embolcall tritigeni) HCLL. El model està format per un canal d'anada i un de tornada, separats per una placa refrigerant. Es contempla la generació de triti, que es variable al llarg del canal i depèn de la distància que hi ha a la primera paret de l'embolcall. Un altre aspecte que es contempla és el moviment dels fluids, tan el plom-liti com l'heli, i els efectes que pot tenir sobre la permeabilitat del triti.

No es contempla la generació de calor deguda a la reacció liti-n, ni la transferència de calor entre el plom-liti, la placa de metall i l'heli. Tampoc es consideren els efectes sobre la permeabilitat de la generació de bombolles d'heli en el si del plom-liti, ni els efectes magneto-hidràulics dels camps magnètics als quals se sotmet el plom-liti.





3. EMBOLCALL TRITIGENI TBM

En aquest capítol s'utilitzen les referències [1], [2], [3], [4] i [5].

3.1. INTRODUCCIÓ

El triti és un dels elements utilitzats com a combustible en els reactors de fusió. Les reserves són molt escasses i la seva obtenció és força costosa, de manera que la generació de triti en el propi reactor és un factor clau en el desenvolupament de futurs reactors de fusió comercials. L'altre combustible utilitzat és el deuteri, isòtop que està present abundantment en la natura. Actualment es treballa en el desenvolupament dels reactors de fusió D-T ja que són els que presenten menys problemes tècnics a l'hora d'aconseguir que es produeixi la reacció de fusió.

El control de l'inventari de triti és una de les claus de la seguretat en un reactor de fusió.

En l'actualitat el triti és un material molt escàs i vinculat a l'ús militar per armament nuclear. Per a us civil, es disposa de menys de trenta quilos de triti, la meitat (aproximadament) del qual serà consumit a l'experiment ITER. Si la fusió ha d'esdevenir un recurs energètic, es imprescindible, doncs, que les centrals de fusió s'autoabasteixin de triti mitjançant l'aprofitament dels neutrons produïts en el plasma per induir reaccions nuclears tritigèniques a la paret.

A més a més, el triti suposa un problema en la seguretat degut a la seva perillositat. Es tracta d'un núclid radioactiu que té molta facilitat per permear. Per tant, el disseny de l'embolcall tritigeni és un factor clau en el desenvolupament dels reactor de fusió per tal de resoldre aquests problemes.

En aquest sentit s'han desenvolupat els diferents dissenys d'embolcalls tritigenis per al reactor de fusió DEMO (*DEMONstration Power Plant*). DEMO és un projecte de reactor de fusió comercial, que es pretén desenvolupar en base a l'èxit esperat d'ITER.

Les principals funcions del mantell reproductor són:

- actuar com a blindatge interior del reactor.
- extreure la calor generada en el si del reactor.
- generar triti.

Per tal de posar a prova els dissenys d'embolcall més eficients concebuts per a DEMO, aquests s'han adaptat a les dimensions i condicions d'operació d'un port del reactor



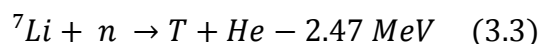
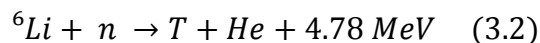
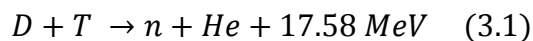
experimental ITER, un dels objectius del qual és precisament provar aquests nous dissenys i estudiar-ne la viabilitat.

3.2. L'EMBOLCALL TRITIGENI

L'embolcall tritigeni TBM (*Test Blanket Module*) ha estat adaptat per a poder funcionar a ITER. Existeixen diversos dissenys de TBM, com per exemple el HCPB (*Helium Cooled Peeble Bed*), HCML (*Helium Cooled Molten Lithium*), DCLL (*Dual Coolant Lead Lithium*), o HCLL (*Helium Cooled Lead Lithium*) entre d'altres. Tot i les diferències que presenten entre els diversos dissenys, tots ells responen a una mateixa funcionalitat.

L'embolcall tritigeni es troba situat a les parets interiors de l'estructura toroïdal del reactor que confina el plasma. Es tracta d'un tipus de confinament magnètic que s'aconsegueix mitjançant forts corrents d'inducció magnètica en les bobines toroïdals. Aquesta paret està formada per unitats modulars independents. Cadascun dels mòduls consta d'una primera paret que fa la funció de blindatge dels diversos components estructurals del reactor dels neutrons produïts en la reacció de fusió.

Com s'ha esmentat anteriorment, una de les funcions del mòdul TBM és la generació de triti. Per a complir aquesta funció s'utilitza liti. El liti reacciona amb els neutrons emesos en la reacció de fusió deuteri-triti (equació 3.1) generant triti, heli i energia (equacions 3.2, 3.3).



En el cas de l'embolcall tritigeni HCLL s'utilitza un aliatge líquid de Liti i Plom, mentre que en el disseny HCPB (*Helium Cooled Peeble Bed*) la reproducció es realitza mitjançant un liti en estat sòlid en forma ceràmica.

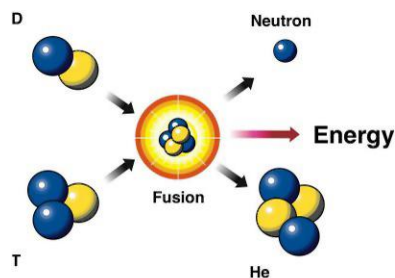


Fig. 3.1. Reacció de fusió D-T



3.3. DISSENY HCLL

Aquest projecte es centra en el disseny TMB-HCLL, ja que és el disseny que estan desenvolupant els grups d'investigació europeus i en el qual treballa el Grup d'Estudis Termohidràulics de la Secció d'Enginyeria Nuclear. En aquest tipus d'embolcall regenerador s'utilitza heli com a fluid refrigerant i una aliatge líquid de liti i plom com a element generador de triti. Concretament, es tracta d'un aliatge eutèctic de plom amb un percentatge del 15.7% de liti (Pb-15.7Li).

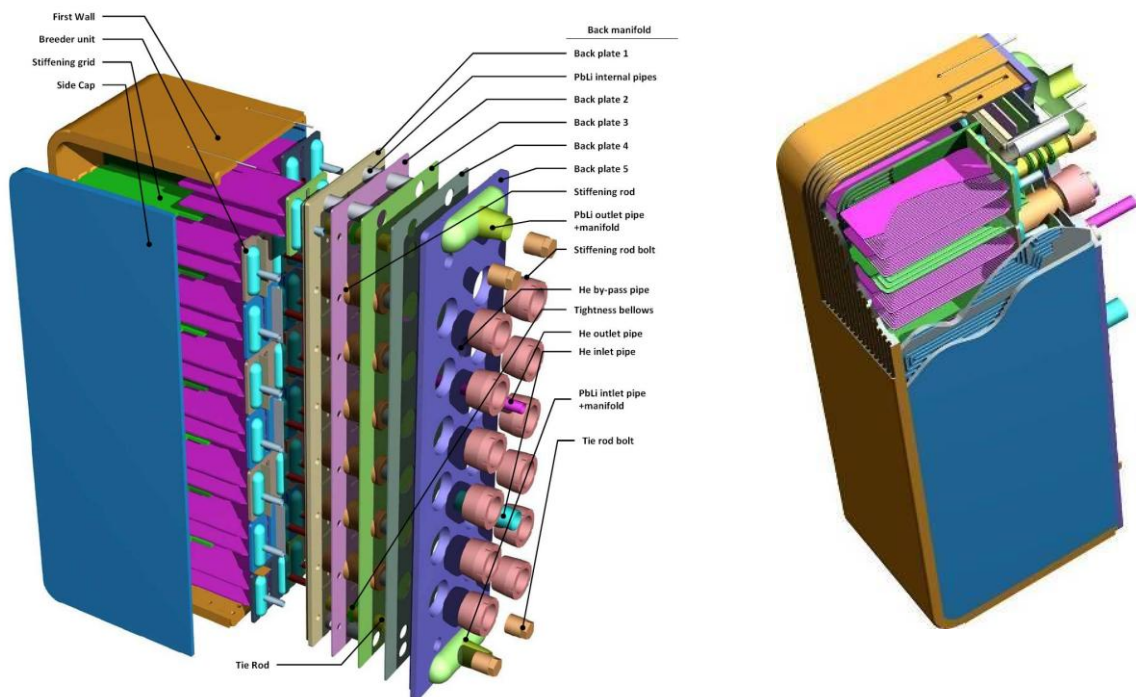


Fig. 3.2. Representació d'un mòdul TMB-HCLL [7]

Com es pot observar a la figura 3.2 el mòdul consta de dos circuits independents: el circuit del líquid reproductor (Pb-15.7Li), i el circuit del fluid refrigerant (He). Tots dos circuits es divideixen per tal d'alimentar les diferents unitats reproductores o *Breeder Units* (BU). En aquests submòduls és on té lloc la reproducció de triti.

A l'interior de les unitats reproductores el metall líquid circula a baixa velocitat (~ 1 mm/s) per tal d'assegurar que la producció de triti sigui suficient. Al llarg del circuit, es recupera el triti generat mitjançant el sistema d'extracció de triti TES (*Tritium Extraction System*).



Per altra banda, l'heli circula per l'interior de les unitats reproductores bescanviant calor que posteriorment s'utilitzarà per a generar electricitat.

El metall líquid entra a la unitat reproductora fred i lliure d'àtoms de triti. Es distribueix en diferents canals on es produirà triti mitjançant les reaccions nuclears descrites en les equacions 3.2 i 3.3, augmentant també la seva temperatura. Cadascun dels canals està format per un mòdul amb el seu interior separat per plaques paral·leles refrigerades per heli (*cooling plates*) que actuaran a la vegada com a extractor de triti i com a refrigerant. En les figures 3.3 i 3.4 es mostra una unitat reproductora on es poden observar les plaques refrigerants (CPs) i l'entrada i sortida del circuit d'heli i la circulació de Pb-15.7Li.

Tan horitzontal com verticalment es disposen unes plaques de reforç o *stiffening plates* (SP) que com el seu nom indica formen una estructura de suport per al mòdul.

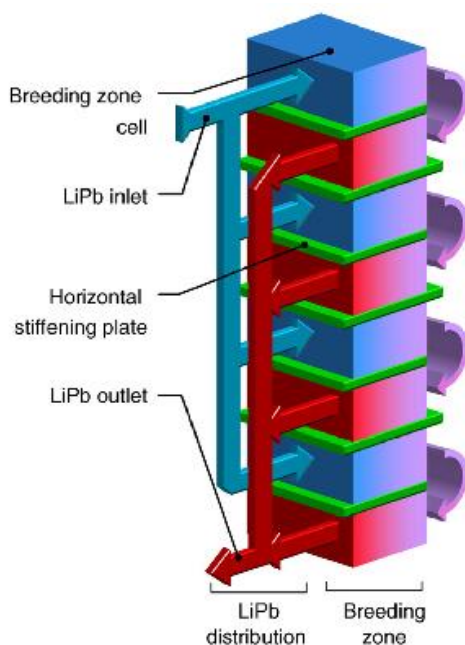


Fig. 3.3. Circulació de Pb-15.7Li a la unitat reproductora (BU) [8]

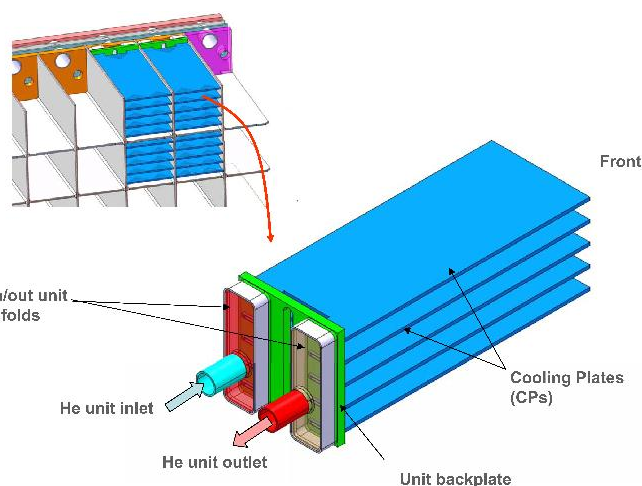


Fig. 3.4. Representació d'una unitat reproductora (BU) [7]

En l'últim disseny existent cada unitat reproductora consta de 4 canals de distribució. Les dimensions d'un TBM són de 2.1 m. en la direcció toroidal i 1.8 m. en direcció poloidal, amb un gruix radial d'un metre aproximadament. Cada TBM està format per 16 unitats reproductores (BU), 8 distribuïdes en la direcció toroidal i 2 en la poloidal.



3.4. SIMULACIÓ DEL TRANSPORT DE TRITI

La simulació del transport de triti en sistemes com els de ITER és una eina imprescindible des del punt de vista de la seguretat, el disseny i operació del reactor. Actualment, l'únic programa oficial per a ITER pel que fa a la simulació del transport de triti és el TMAP7. Tanmateix, els codis CFD permeten realitzar càlculs similars.

Un codi CFD (*Computational Fluid Dynamics*) és un software especialitzat que permet resoldre problemes de transferència de calor, massa i moment, sota diverses condicions i geometries. La resolució es realitza mitjançant la resolució de les equacions de conservació pertinents. Pel que fa al transport de triti els més utilitzats són: OpenFOAM, Fluent, CFX, CAST3M i COMSOL. Aquests codis no presenten tantes limitacions com TMAP7, ja que no són tan especialitzats, de manera que donen a l'usuari major flexibilitat en la modelització de sistemes, però presenten limitacions per modelar sistemes grans ja que requereixen d'una elevada potència de càlcul.

Sigui com sigui, TMAP7 ha estat àmpliament validat per nombrosos experiments que fan que el codi sigui més quantitativament parlant, cosa que no passa encara amb els codis CFD. Així doncs, TMAP7 és l'únic codi oficial per a ITER pel que fa al transport de triti.

TMAP7 és el programa escollit en aquest treball per a realitzar les diferents simulacions, tant per l'interès intrínsec que té fer càlculs amb ell com per a poder disposar de resultats amb que poder comparar els obtinguts amb codis CFD.





4. TMAP7

En aquest capítol s'utilitzen les referències [6] i [7].

4.1. INTRODUCCIÓ

El codi de càlcul TMAP va ser escrit a l'Idaho National Laboratory per Brad Merrill i James Jones a final dels anys 80. Amb la creació d'aquest codi es pretén proporcionar una nova eina per a la realització de l'anàlisi de seguretat de sistemes que treballin amb triti. La seva primera actualització, TMAP4, va ser utilitzada en nombroses aplicacions, entre elles diversos experiments de seguretat en fusió i simulacions per als sistemes de producció de triti d'ITER. Posteriorment s'han presentat les actualitzacions TMAP2000 i TMAP7, aquesta darrera comercialitzada després d'un extens procés de validació i verificació.

4.2. MODEL DE TRANSPORT

TMAP7 és un codi de càlcul desenvolupat específicament per al transport d'hidrogen i els seus isòtops a través de metalls, tot i que es pot adaptar a sistemes amb d'altres elements. Aquest codi, permet calcular l'evolució temporal de les espècies definides en sistemes d'estructures de materials sòlids o, fins i tot, de materials disposats en sèrie connectats amb volums de gas o recintes per als següents fenòmens:

- El transport de les espècies dissoltes a través de superfícies. En aquest cas la interacció pot estar governada per les lleis de dissociació-recombinació, per lleis de solubilitat (com les lleis de Henry o de Sievert), o bé l'impossibilitat de travessar la superfície.

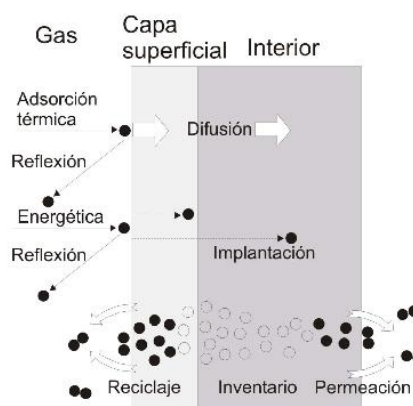


Fig. 4.1. Processos d'interacció entre espècie hidrogenoide i material.



- La difusió (seguint la llei de Fick) a través de l'estructura. Per aquest cas també s'incorpora l'opció de considerar l'atrapament dels àtoms a l'estructura.
- La resposta tèrmica de les estructures per a un flux de calor aplicat o bé per condicions frontera de temperatura.
- Reaccions químiques als recintes.
- Flux convectiu entre recintes.

El càlcul dels fenòmens esmentats és unidimensional, és a dir, que el codi només permet avaluar el transport de les espècies definides en una sola direcció.

A continuació, es tractaran amb més detall aquells aspectes de desenvolupament físic del model que afecten a les simulacions que intervenen en els casos d'estudi.

4.2.1. Transport a través de les superfícies

El transport dels gasos a través de superfícies sòlides sovint està governat pel fenomen de dissociació-recombinació.

Generalment, quan es tracta de metalls, aquest procés s'aproxima suficientment ràpid a l'equilibri com per a poder aplicar la llei de Sievert.

Per altra banda, per a superfícies no metàl·liques es pot aplicar la llei de Henry (les molècules són absorbides i desorbides).

L'adsorció-desorció de molècules des d'una superfície que no està en equilibri amb el gas pot estar limitada per fenòmens d'activació tèrmica a la superfície.

4.2.1.1. Dissociació-recombinació

A TMAP7 es consideren dos tipus de models de dissociació-recombinació: *ratedep* y *surfdep*. En les simulacions realitzades en els casos d'estudi s'aplica el tipus *ratedep*, el qual s'analitzarà amb més profunditat a continuació. El tipus *surfdep* implica una formulació més complexa dels processos i només s'esmenta a continuació per comparar-lo amb el *ratedep*.

En el model *ratedep* la dissociació es modela de la forma següent: les molècules provinents del gas arriben a la superfície, es dissocien de forma pràcticament immediata donant dos àtoms de superfície (producte de la dissociació). Una vegada dissociats els àtoms es difondran a través del material. En el model *surfdep* les molècules són adsorbides des del gas; el procés de dissociació es considera de forma independent.



En la recombinació *ratedep*, la relació entre les taxes de generació i d'alliberament de molècules es formula com el producte de dues concentracions atòmiques en superfície i un coeficient de recombinació, que relaciona la taxa de producció molecular amb les concentracions dels àtoms constituents en la superfície. Les molècules formades són alliberades ràpidament per a passar a formar part del gas. En el model *surfdep*, en canvi, les molècules formades no s'alliberen immediatament, sinó que el seu alliberament, activat tèrmicament, està relacionat amb l'energia d'enllaç a la superfície.

Sota condicions de dissociació-recombinació *ratedep* encara no hi ha consens sobre si els àtoms que hi prenen part són únicament els de la superfície o també intervien àtoms situats a una capa o dues de profunditat a la xarxa cristal·lina. A TMAP7 es considera que únicament intervien en el procés els àtoms de la superfície.

Sota aquestes condicions, el flux net a la superfície d'àtoms de l'espècie "s" ve donat per:

$$J_s = \sum_{m=1}^k at_{m,s} J_m \quad (4.1)$$

$$J_m = k_{d,m} P_m - \sum_{i,j}^n k_{r,m} C_i C_j \quad (4.2)$$

On J_s és el flux d'àtoms de l'espècie "s" a la superfície des del recinte, $at_{m,s}$ el nombre d'àtoms de l'espècie "s" en una molècula de l'espècie "m", J_m el flux molecular de l'espècie "m" a la superfície, $k_{d,m}$ el coeficient de dissociació de l'espècie molecular "m" a la superfície, P_m la pressió parcial de l'espècie molecular "m" sobre a superfície, $k_{r,m}$ el coeficient de recombinació per a l'espècie molecular formada per un àtom de l'espècie "i" i un de "j", i C_i i C_j són les concentracions a la superfície de les espècies "i" i "j" respectivament.

Aplicant la llei de conservació de massa per a l'espècie "s" a la superfície es té que:

$$\begin{aligned} \sum_i at_{m,s} (P_{m,i} k_{d,m,i} - k_{r,m,i} C_s C_j) + D_s \left(\nabla C_s + C_s \frac{Q_s^*}{k_b T^2} \nabla T \right) + \sum_j \frac{C_s C_j D_s}{N \lambda} \\ + \sum_k \frac{C_k C_j D_k}{N \lambda} + C_s \lambda \left[v_0 \exp \left(-\frac{E_b}{k_b T} \right) - v_s \right] = 0 \quad (4.3) \end{aligned}$$

On $C_{s,j,k}$ és la concentració de les espècies atòmiques "s", "j", "k", a la superfície, D_s la difusivitat de "s" a prop de la superfície, Q_s^* és el coeficient de Ludwig-Soret de "s" al material, v_0 és la freqüència de Debye ($\sim 10^{13} \text{s}^{-1}$), N la densitat atòmica, k_b la constant de



Boltzman, λ la distància de xarxa (m), T la temperatura (K), E_b l'energia d'unió per a la dissociació molecular, i ν_s la freqüència de decaïment radioactiu per als àtoms de l'espècie "s".

En l'equació 4.3, el flux net d'àtoms de "m" sobre la superfície ve donat pel primer terme entre parèntesi. El segon terme és el flux atòmic de difusió des del recinte a la superfície. El tercer i quart terme representen la recombinació de les espècies "k" i "j" amb l'espècie "s". Finalment, el darrer terme de l'equació és el rati de dissociació de l'espècie "s".

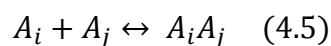
4.2.1.2. Llei de solubilitat

La solubilitat d'una substància és la propietat química que mesura la capacitat d'aquesta substància de dissoldre's en una altra. La forma general de la llei de solubilitat relaciona la concentració de dita substància en el material amb la pressió parcial del gas sobre la superfície mitjançant una constant:

$$C_i C_j = k_{ij} P_m^n \quad (4.4)$$

On C_i i C_j són les concentracions a la superfície de les espècies que es combinen, k_{ij} és la constant d'equilibri de l'espècie molecular "m" (formada de la combinació de "i" i de "j"), i P_m serà la pressió parcial de "m" a la superfície.

Cal destacar que és simplement la reafirmació de la llei d'acció de masses per a la reacció:



Com per exemple la reacció: $T + H \leftrightarrow HT$

On l'espècie molecular es forma a partir d'un àtom de T i un altre d' H. La constant d'equilibri abans esmentada està relacionada amb l'energia lliure de formació de la molècula, ΔG_f .

$$k_{ij} = \exp\left(-\frac{\Delta G_f}{k_b T}\right) \quad (4.6)$$

Quan la dissociació-recombinació són suficientment ràpides com per existir equilibri entre les fases gas i sòlid del solut s'aplica la **llei de Sievert**. Sota aquestes condicions, a TMAP7 cal imposar la condició de contorn *lawdep*. Aquesta condició s'aplica generalment a interfícies metall-liquid, on els fenòmens de superfície són suficientment propers a l'equilibri.



Per a espècies homonuclears (molècules formades per àtoms de la mateixa espècie) la constant de solubilitat de Sievert és:

$$k_s = \exp\left(\frac{\Delta S_f}{2k_b}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_f}{2k_b T}\right) \equiv k_{s0} \exp\left(-\frac{E_s}{k_b T}\right) \quad (4.7)$$

on ΔS_f i ΔH_f són l'entropia i l'entalpia de formació, respectivament, per als àtoms dissolts i E_s és l'energia d'activació.

De tal manera que l'equació 4.4 queda reduïda a l'expressió:

$$C_i = k_s P_m^{0.5} \quad (4.8)$$

D'aquesta llei es dedueix que per a poder haver-hi pressió parcial de la molècula sobre la superfície és necessari que existeixi certa concentració a la superfície dels àtoms constituents.

Un altre cas particular de la llei de solubilitat és la **lleï de Henry**. La llei de Henry s'aplica en aquelles situacions properes a l'equilibri en les quals les molècules penetren i surten de la superfície sense produir-se dissociació ni recombinació moleculars. En aquest cas l'expressió 4.4 serà:

$$C_m = k_H P_m \quad (4.9)$$

4.2.1.3. Condició de flux nul o *Nonflow*

La tercera i darrera condició aplicada en el tractament de superfícies és la condició de flux zero. Sota aquestes condicions, el flux a través de la superfície és nul. És a dir, s'imposa que el gradient de concentració sigui zero per a les espècies de difusió.

4.2.2. Difusió a través d'estructures

En un sòlid, el flux d'àtoms dissolts en ell provocat per un gradient de concentració segueix la direcció en que es minimitza aquest i és proporcional a ell (1^a Llei de Fick). Prenent com a direcció de difusió l'eix x l'expressió serà:

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4.10)$$

on la difusivitat D ve donada per:



$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{k_b T}\right) \quad (4.11)$$

on E_d és l'energia d'activació per a la difusió i D_0 el coeficient màxim de difusió (valor que s'assoleix quan la temperatura tendeix a infinit).

Aplicant la llei de conservació de la massa a l'equació (4.10) s'obté el que es coneix com a segona llei de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (4.12)$$

En el cas d'existir gradient tèrmic apareix el fenomen conegut com termodifusió (efecte Soret):

$$J_t = -CD \frac{Q^*}{k_b T^2} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (4.13)$$

on Q^* és el coeficient de Soret o calor de termodifusió.

Finalment, es té que el balanç microscòpic de matèria seria:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \left(\frac{\partial C}{\partial x} + C \frac{Q^*}{k_b T^2} \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right] + S \quad (4.14)$$

On S representaria un possible terme font q tindria en compte possibles reaccions químiques o nuclears, processos d'adsorció, etc..

4.2.3. Evolució dels recintes

A TMAP7 es defineixen dos tipus de recintes: els recintes *funcionals* i els recintes *frontera*.

Els recintes frontera representen entorns predefinits que no varien el seu estat davant fluxos convectius o efectes de difusió. Es solen emprar en les simulacions com a fonts o com a embornals.

Per altra banda, els recintes de tipus funcional representen aquells recintes que permeten la realització del càlcul dinàmic de la pressió i les reaccions químiques durant la simulació. També poden existir fluxos de difusió des del recinte cap a les superfícies i viceversa, així com entre recintes (independentment de si són funcionals o frontera). A continuació es detallen les equacions que governen l'evolució dels recintes funcionals.



Considerant un recinte “i” i aplicant el mètode de les diferències finites, l'evolució temporal del recinte funcional vindrà donada per:

$$V_i \frac{C_{m,i|t_1} - C_{m,i|t_0}}{\Delta t} = \sum_j C_{m,j|t_1} q_{ji} - C_{m,i|t_1} \sum_j q_{ij} - \sum_k A_k J_{m,k} + V_i S_{m,i} \quad (4.15)$$

On V_i és el volum del recinte “i”, $C_{m,i|t}$ la concentració de “m” en el recinte “i” per a l' instant “t”, q_{ij} és el flux de l'espècie molecular “m” des del recinte “i” al recinte “j”, A_k l'àrea de la superfície adjacent “k”, $J_{m,k}$ el flux de l'espècie “m” a la superfície “k”, i $S_{m,i}$ la generació de l'espècie “m” en el recinte “i”.

De l'expressió 4.15 es dedueix que el rati d'augment de la concentració de l'espècie molecular “m” al recinte “i” és la suma del flux de “m” arribat d'altres recintes confrontants, menys el flux cap a recintes confrontants i cap a les superfícies adjacents, més la generació en el propi recinte mitjançant reaccions químiques.

TMAP7 resol l'equació 4.15 amb el mètode d'iteració Newton Raphson. Així que per a qualsevol temps de pas “t” es té

$$C_{m,i|t+1} = C_{m,i|t} - b \frac{f}{\frac{\partial f}{\partial C_{m,i}}} \quad (4.16)$$

on b és un paràmetre per optimitzar la convergència i la funció “f” es defineix com:

$$f(C_m) = V_i \left(\frac{C_{m,i|t} - C_{m,i|0}}{\Delta t} \right) - \sum_j C_{m,j|t} q_{ji} - C_{m,i|t} \sum_j q_{ij} - \sum_k A_k J_{m,k} + V_i S_{m,i} \quad (4.17)$$

I la seva derivada respecte la concentració serà:

$$\frac{\partial f}{\partial C_m} = \frac{V_i}{\Delta t} + \sum_j q_{ji} - \sum_k A_k \frac{\partial J_{m,k}}{\partial C_m} - V_i \frac{\partial S_{m,i}}{\partial C_{m,i}} \quad (4.18)$$

El flux de molècules cap a la superfície ($J_{m,k}$) dependrà de la condició de contorn imposada al segment de difusió corresponent.



Per una banda es té que per a la condició frontera de *ratedep*, el flux molecular a la superfície venia donat per l'equació (4.2).

$$J_{m,k} = k_{d,m}P_m - \sum_{i=1} k_{r,ij} C_{i,k} C_{j,k} \quad (4.19)$$

Aleshores, amb la relació:

$$P_{m,i} = C_{m,i} k_b T_{r,i} \quad (4.20)$$

on $T_{r,i}$ és la temperatura del recinte "i".

Es dedueix que

$$\frac{\partial}{\partial C_{m,i}} J_{m,k} = k_{d,m,k} k_b T_{r,i} \quad (4.21)$$

Per altra banda, si la condició aplicada és la de *lawdep*, on la concentració del solut a la superfície ve relacionada amb la pressió parcial del gas sobre la superfície a través de la llei de solubilitat, el flux de constituents a la superfície serà:

$$J_{s,f} = k_\lambda (C_{m|t} k_B T_r)^n (g_{t2} - g_2) + C_{s1|t} (g_{t2} - g_2) \quad (4.22)$$

on k_λ és el coeficient de solubilitat apropiat segons si s'aplica llei de Sievert o Henry.

$$g_2 = \frac{D_{sf} + D_{s1}}{\Delta x_1} \quad (4.23)$$

$$g_{t2} = \frac{Q_{sf}^* + Q_{s1}^*}{R(T_f - T_1)} (T_f - T_1) g_2 \quad (4.24)$$

Per a la iteració de Newton derivada de l'equació (4.18) es troba:

$$\frac{\partial}{\partial C_m} J_{s,k} = n k_s (k_B T_r)^n C_m^{n-1} (g_{t2} - g_2) \quad (4.25)$$

Primerament es troben els fluxos a la superfície de les espècies constituents, com per exemple H i D, assumint que tan sols hi ha interacció amb les espècies homonuclears (H_2 , D_2). Es determinen també els fluxos convectius amb altres recintes i la generació d'àtoms de les espècies mitjançant reaccions químiques. Posteriorment s'imposa l'equilibri per tal de



determinar les concentracions de les espècies heteronuclears. La concentració total de les espècies A i B és:

$$\left. \begin{aligned} C_A &= C_{AB} + \frac{C_{A,m}}{v_A} \\ C_B &= C_{AB} + \frac{C_{B,n}}{v_B} \end{aligned} \right\} \quad (4.26)$$

D'on es dedueix que:

$$\left. \begin{aligned} C_{A,m} &= (C_A - C_{AB})v_A \\ C_{B,n} &= (C_B - C_{AB})v_B \end{aligned} \right\} \quad (4.27)$$

Per tal de satisfer l'equilibri, la concentració d'equilibri C_{AB} es calcula mitjançant mètodes iteratius emprant l'expressió:

$$C'_{AB} = h[(C_A - C_{AB})v_A]^{v_A}[(C_B - C_{AB})v_B]^{v_B} \quad (4.28)$$

On h és un coeficient numèric funció del temps i v_i són els coeficients estequiomètrics de les espècies A i B.

Una vegada determinades, es recalculen les concentracions de les espècies homonuclears emprant les relacions anteriors (4.27).

Finalment, si la condició aplicada a la superfície és la condició de flux zero, no hi ha combinació entre les molècules del gas al recinte amb cap flux d'àtoms que arribi a la superfície del material. Per tant, el terme " $J_{m,k}$ " desapareix de la funció " f " del mètode Newton-Raphson.

4.3. MÈTODE NUMÈRIC

El mètode que utilitza TMAP7 per resoldre de la majoria de les equacions d'estat que es resolen en les simulacions es realitza mitjançant l'aplicació del mètode de les diferències finites. Aquest mètode avalua les equacions diferencials del model en segments discrets del domini a estudiar. La discretització es realitza mitjançant nodes, els quals delimiten el tamany dels diferents segments.



En l'anàlisi numèric, el mètode de les diferències finites és un mètode utilitzat per a calcular de forma aproximada les solucions de les equacions diferencials mitjançant equacions diferencials finites per aproximar les seves derivades.

Una diferència finita és una expressió de la forma $f(x+b) - f(x+a)$. Si es divideix una diferència finita per $(b - a)$ s'obté una expressió similar al quocient diferencial, amb la diferència que en aquest cas s'utilitzen quantitats finites en comptes de diferencials. Les diferències finites es classifiquen en tres formes diferents: anterior, posterior i central. Per al cas concret del model la forma utilitzada és l'anterior. Aquesta és una expressió de la forma:

$$\Delta[f](x) = f(x + h) - f(x) \quad (4.28)$$

Per altra banda, la derivada d'una funció en un punt x es defineix pel límit:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x + h) - f(x)}{h} \quad (4.29)$$

Si h té un valor fixat no nul, aleshores, el terme de la dreta de l'expressió anterior és

$$\frac{f(x + h) - f(x)}{h} = \frac{\Delta[f](x)}{h} \quad (4.30)$$

Per tant, la diferència anterior dividida per h aproxima a la derivada quan h és petit.

4.4. ESTRUCTURA D'UN ARXIU D'ENTRADA O INPUT

Els arxius d'entrada del Codi TMAP7 s'estructuren en 9 blocs que contenen tota la informació necessària per a la realització de la simulació i la posterior extracció de dades. Cada un d'ells ha de començar amb la declaració "*nom_del_bloc input*" i finalitzar amb la declaració "*end of nom_del_bloc input*".

Alguns dels blocs contenen paràmetres que és obligatori definir per al correcte funcionament del codi. En canvi, altres blocs poden restar buits d'informació, tot i que les declaracions d'inici i final s'han d'incloure.



Exceptuant el bloc que conté el títol, totes les instruccions d'entrada incloses en un bloc han de concloure amb la declaració “;end ”, per tal que el preprocessador reconegui que la instrucció ha conclòs.

Si es desitja incloure comentaris en qualsevol de les línies de l' *input* s'ha d'incloure el símbol “\$” a l'inici del comentari. A més a més, no es poden incloure línies en blanc a l' *input*.

Totes les dades que es defineixen a TMAP7 tenen les unitats del sistema internacional.

El Codi TMAP7 és capaç d'executar problemes que involucrin diferents segments de difusió, connectats entre si o als diferents volums o recintes definits. Aquests recintes, alhora, poden estar connectats a altres segments i/o recintes. Tanmateix, aquest model presenta les següents limitacions d'estructura:

- El nombre màxim d'estructures tèrmiques/de difusió és de 50, amb un número total de nodes inferior a 1000. Aquestes estructures són referenciades al codi com *thermsecs* i/o *diffsecs*. Tant per a càlculs tèrmics com difusius l'estructura és la mateixa, únicament s'anomena diferent depenent del bloc d'entrada (tèrmic o de difusió). El final d'un *thermsecs/diffsecs* només pot interactuar amb un únic recinte.
- Es contempla l'opció de vincular estructures (*thermsecs/ diffsecs*) per tal de crear elements compostos.
- El nombre màxim d'espècies de difusió és 10.
- El càlcul tèrmic per a cada *thermsecs/ diffsecs* és opcional.
- Els càlculs de captura per a cada *thermsecs/ diffsecs* són opcionals.
- El nombre màxim de recintes que es pot definir és 40. Cada recinte pot interactuar amb més d'un *thermsecs/ diffsecs*.
- El nombre màxim de línies de flux entre recintes és 100.
- El nombre màxim d'espècies de recinte que es pot definir és 10.
- El nombre màxim de reaccions químiques que es poden definir per recinte és 50.
- El nombre màxim d'equacions que es pot definir és 50.
- El nombre màxim de taules que es pot definir és 10, amb un total de 240 parelles de dades.
- Dels nou blocs de què consta un arxiu d'entrada o *input*, vuit d'ells s'han de definir en l'ordre requerit, encara que estiguin buits.



- Les declaracions de cada bloc són independents de l'ordre tot i que la majoria s'han de definir obligatòriament.

A continuació es realitza una breu descripció de cadascun dels blocs amb les dades que han de contenir, així com el seu significat dins el codi.

4.4.1. Dades inicials (Title input, Main Input)

Les dades inicials del sistema es defineixen en els dos primers blocs de l'arxiu d'entrada.

En el primer dels blocs l'única declaració que hi ha és el títol de l'arxiu d'entrada.

```
title input
Problem #9a. Chemical equilibration on polycrystalline tungsten surface
using conventional dissociation-recombination boundary condition.
end of title input
```

Exemple "input" 4.4.1. Declaració del títol

```
main input
dspcnme=td,end
espcnme=t,end
segnds=22,22,end
nbrencl=2,end
linksegs=1,2,end
end of main input
```

En el segon bloc es defineixen els diferents tipus d'espècies (de difusió, de recinte o de superfície), el nombre de nodes de cadascun dels segments de difusió-tèrmics i el nombre de recintes del problema.

Exemple "input" 4.4.2. Declaració de les dades inicials del problema

En el fragment d'exemple es declaren l'espècie de difusió TD i l'espècie de recinte T. El nombre de segments definits és de 2, connectats entre si (*linksegs*) i discretitzats per 22 nodes cadascun. També es declaren dos recintes.

4.4.2. Dades de recinte (Enclosure Input)

Tal i com indica el seu nom, en aquest bloc es defineixen els diferents paràmetres relatius a la geometria del problema; concretament, als recintes. Com ja s'ha indicat anteriorment es poden definir dos tipus de recintes diferents. Al declarar un recinte s'ha de numerar i s'ha d'especificar de quin tipus és (funcional o frontera). Després de declarar un recinte s'han de definir certs paràmetres del recinte. Els paràmetres a definir seran diferents si es tracta d'un recinte funcional o d'un frontera.



Els recintes funcionals poden contenir fins a 5 declaracions. N'hi ha dues d'opcionals, que són els fluxos de fluid entre recintes i les reaccions químiques que s'hi produeixen. Els paràmetres obligatoris són: la temperatura, la pressió parcial de cada una de les espècies de recinte, i el volum. Per a la temperatura, com succeeix en moltes altres declaracions, el seu valor es pot especificar com una constant, com una taula que depengui del temps, o bé com una equació.

```
enclosure input
start func,2
etemp=303.0,end
esppres=t2,0.0,end
reaction=nequ,0,end
evol=1.0,end
outflow=nbrflwp,1,
qflow,const,0.1,rencl,3,end
```

Exemple "input" 4.4.3. Declaració de les dades d'un recinte funcional

En l'exemple [4.4.3] es mostra la declaració d'un recinte funcional. Com es pot observar a la figura, en la declaració dels fluxos entre recintes cal especificar el nombre d'intercanvis de flux (*nbrflwp*), el valor del flux i el recinte receptor d'aquest flux. El nombre d'intercanvis de flux fa referència a la quantitat de fluxes que surten del recinte. Per exemple, si des d'un recinte "A" surt un flux cap a un recinte "B" i un altre cap a un tercer recinte "C", el nombre d'intercanvis de flux seria de dos.

Per altra banda, als recintes frontera es poden declarar 3 paràmetres diferents. Un d'ells són els fluxos de fluid entre recintes que com succeeix amb els funcional serà un paràmetre opcional. Els altres dos són la temperatura i la pressió parcial de les espècies de recinte (obligatoris). Per als recintes frontera, a diferència dels recintes funcionals, la pressió parcial es mantindrà invariable al llarg de la simulació.

```
start bdry,2
etemp=600.0,end
esppres=t,0.0,end
```

Exemple "input" 4.4.4. Declaració d'un recinte frontera



4.4.3. Dades tèrmiques (Thermal Input)

Com en el bloc anterior, l'apartat tèrmic també es divideix en diferents sub-blocs, que corresponen a cadascun dels diferents segments de difusió/transferència de calor. Si es declara més d'un segment, aquests seran contigus i estaran connectats per una de les cares de cada segment. També es defineix la geometria dels segments (longitud total i separació entre nodes), i la temperatura de cada node. D'igual forma que amb d'altres paràmetres la temperatura es pot entrar com un valor constant, una equació o bé una taula funció del temps.

```
thermal input
start thermseg,end
$ 1-mm foil [THERMSEG 1]
delx=0.0,10*1.0e-4,0.0,end
tempd=12*1000.,end $      Constant temperature (K)
end of thermal input
```

Exemple "input" 4.4.5. Declaració d'un segment tèrmic

Com es pot observar, l'exemple consta d'un únic segment d'un mil·límetre de longitud, a temperatura constant i dividit per 12 nodes equidistants.

4.4.4. Dades de difusió (Diffusion Input)

Aquest bloc es divideix novament en diversos sub-blocs (cadascun dels segments de difusió). És en aquest bloc, doncs, on s'especificarà tota la informació relativa a la difusió i els fenòmens de superfícies. De manera que per a cada segment de difusió s'haurà d'especificar la densitat de la xarxa cristal·lina, les concentracions inicials de les espècies de difusió, la difusivitat, el coeficient de Soret, la generació (en cas d'existir) de les espècies de difusió, el les dimensions de la superfície de difusió i els fenòmens de superfície. Aquesta última declaració s'ha de realitzar per a les dues cares del segment, podent aplicar més d'un fenomen a cada cara.

Aquesta part és la més important del model, ja que és on s'han de solucionar la major part de les limitacions del codi. A més a més, la modelització dels fenòmens de superfície pot resultar bastant difícil d'ajustar a la realitat del procés.

En l'exemple que hi ha a continuació es mostra el fragment complet de les dades de difusió d'un arxiu *input* amb un únic segment de difusió, amb dissociació-recombinació del tipus *ratedep* en un dels extrems i la condició de flux zero a l'altre. Com es pot observar en



l'exemple [3.4.6] al declarar la condició de contorn *ratedep* s'han de definir les espècies de dissociació-recombinació, així com les constants que governen el procés. En aquest cas les constants de dissociació es defineixen com equacions, mentre que les constants de recombinació tenen un valor numèric constant.

```
diffusion input
$ =====
start diffseg,end
$ 1-mm foil [DIFFSEG 1]
nbrden=6.25e28,end
concd=h,const,1.0,d,const,1.0,end $ Starting mobile concentrations
qstrdr=h,const,0.0,d,const,0.0,end $ Q*/R for Soret effect unknown
dcoef=h,equ,1,d,equ,1,end
srcsd=h,const,0.0,srcpf,const,1.0,d,const,0.0,srcpf,const,1.0,end
difbcl=ratedep,encl,1,
spc,h,exch,h2,ksubd,equ,2,h,ksubr,1.29e-16
exch,hd,ksubd,equ,2,d,ksubr,2.58e-16
spc,d,exch,hd,ksubd,equ,2,h,ksubr,2.58e-16
exch,d2,ksubd,equ,2,d,ksubr,1.29e-16,end
difbcr=nonflow,end
surfa=0.0025,end $ 50 x 50 mm square
end of diffusion input
```

Exemple “input” 4.4.6. Declaració d'un segment de difusió

4.4.5. Equacions definides per l'usuari (Equation Input)

En aquest bloc es declaren totes les equacions definides al model, enumerades convenientment. En el cas de no haver declarat cap equació, el bloc s'inicia i es finalitza sense contenir informació.

Generalment, les equacions s'utilitzen per a definir les diferents constants declarades en el bloc de difusió.

```
equation input
$ (1) Diffusivity for h in tungsten (m2/s)
y=4.1e-7*exp(-3.39/8.625e-5/temp),end $ modified from 0.39 eV
$ (2) Dissociation coefficient at full efficiency
y=1.85802e24/sqrt(temp),end
end of equation input
```

Exemple “input” 4.4.7. Declaració de les equacions del *input*



A l'exemple [4.4.7] les equacions definides son la difusivitat de l'hidrogen en el tungstè i la constant de dissociació.

4.4.6. Taules definides per l'usuari (Table Input)

Com en el bloc anterior, en aquest es definiran les taules declarades al llarg dels blocs anteriors i en cas de no haver definit cap taula, el bloc es declararà sense contingut.

4.4.7. Dades de control (Control Input)

En aquest apartat es declaren els paràmetres relatius al control, tals com el temps inicial, el pas de temps, etc.. La majoria dels paràmetres tenen valors predefinits que no caldrà ajustar, excepte en casos excepcionals, per tal que el problema convergeixi. Si alguns dels valors no fos correcte per al model en concret podria succeir que el problema no convergís.

4.4.8. Dades de gràfics (Plot Input)

Finalment, en aquest bloc es defineixen els paràmetres dels quals es vol obtenir l' informació per al posterior tractament de dades: espècies de difusió i de recinte, segments, recintes i les diferents dades que permet extreure el codi (flux i concentració a les superfícies, inventari mòbil, pressió parcial de cada espècie, ...).

L'extracció de dades es realitza mitjançant taules de dades on es mostra el valor del paràmetre desitjat en funció del temps. És a dir, TMAP7 mostra l'evolució temporal al llarg de la simulació de cadascun dels paràmetres desitjats.



5. APLICACIONS PRÀCTIQUES

El primer cas d'estudi és la simulació d'un experiment realitzat a Japó a la Universitat de Kyushu. Aquest és un experiment que resulta d'interès, ja que es disposa de dades experimentals d'un cas d'utilitat per a la simulació d'un TBM, la modelització del qual és l'objecte d'aquest treball.

El segon cas d'estudi és un TBM-HCLL, el disseny proposat per a ITER. Aconseguir una modelització fiable del TBM és un aspecte de vital importància per al seu disseny i, per tant, per al desenvolupament d'ITER. Com ja s'ha comentat anteriorment l'embolcall tritigeni és un element clau a l'hora d'aconseguir que el reactor pugui operar de forma autosuficient, ja que és l'encarregat d'aportar el triti necessari per a mantenir la reacció de fusió. De manera que aconseguir un model per a poder realitzar simulacions fiables seria un gran pas de cara al desenvolupament del disseny de l'embolcall.



5.1. CAS 1: EXPERIMENT FUKADA

5.1.1. Definició del cas

L'experiment realitzat per la Universitat de Kyushu consta d'un dispositiu experimental dissenyat per a l'estudi del transport de deuteri i hidrogen a través d'una capa de plom-liti i una membrana de ferro- α .

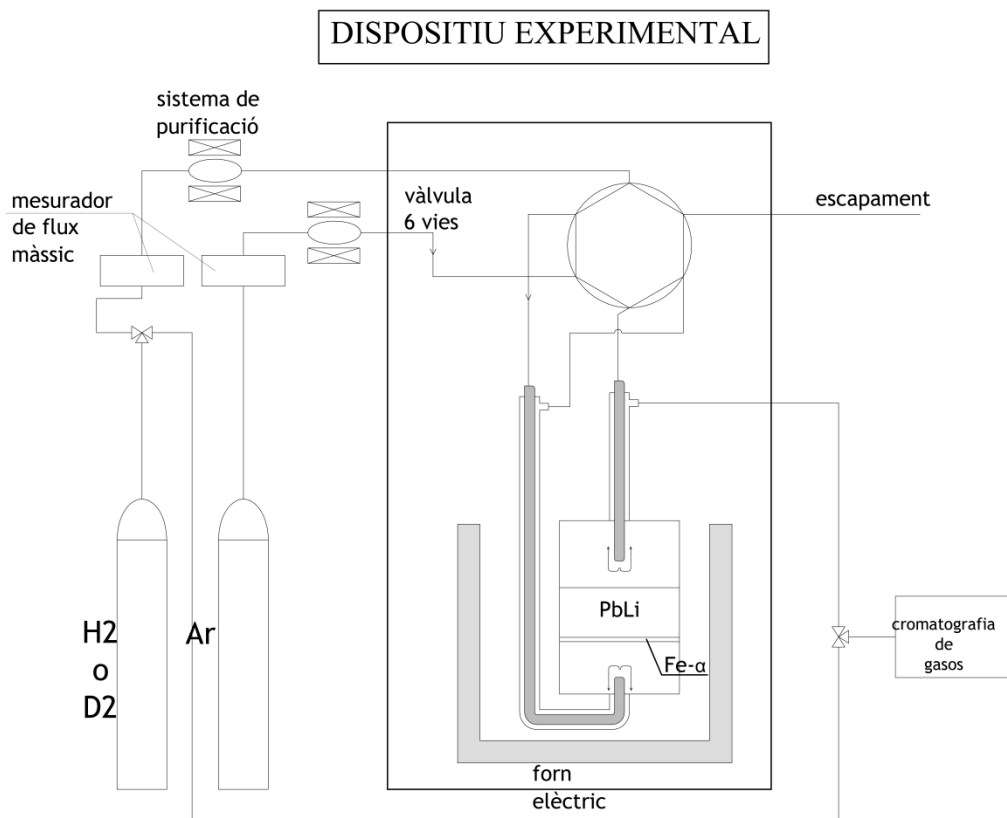


Figura 5.1. Dispositiu experimental

El dispositiu experimental consta de dues bombones de gas, una amb D_2 o H_2 i l'altre amb Argó. La mescla d'aquests dos gasos s'injecta a un cilindre separat en dues cambres pel segment de plom-liti i la membrana de ferro. El gas s'injecta a les cambres a pressió. En la figura 5.1 es mostra un esquema del dispositiu.

Dels resultats de l'experiment s'extreuen les expressions que descriuen la permeabilitat, difusivitat i solubilitat de l'hidrogen i el deuteri en el plom-liti. Aquestes equacions seran les utilitzades en les simulacions realitzades.



De la geometria no se'n tenen dades exactes, per raons de confidencialitat per part de la Universitat de Kyushu. De manera que la geometria utilitzada en les simulacions serà una aproximació a la geometria del dispositiu experimental. El dispositiu consta d'un cilindre de 10 cm de radi, amb dues cambres separades pel plom-liti i la membrana de ferro. Per a la membrana de ferro s'estima un gruix de 0.7 mm, mentre que per al segment de plom-liti es té que la longitud exacta és d'1 cm. En referència al volum de les cambres superior i inferior del cilindre se suposa un valor de 10 dm³.

L'estudi del transport d'hidrogen i deuteri s'ha realitzat mitjançant diversos experiments utilitzant tres configuracions diferents del dispositiu. En la primera configuració s'estudia el transport d'hidrogen a través del plom-liti i el ferro, en la segona s'estudia el transport de deuteri, i en el tercer i últim cas s'estudia el procés d'intercanvi isotòpic entre hidrogen i deuteri.

5.1.2. Configuració A

5.1.2.1. Descripció del model

La primera de les configuracions simulades, la configuració A, servirà per a estudiar el transport d'hidrogen a través del plom-liti i el ferro.

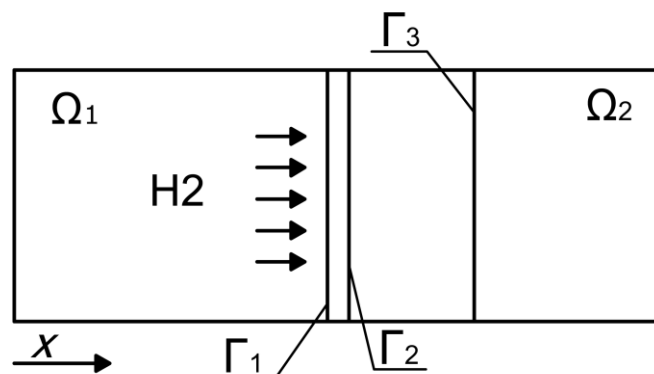


Figura 5.2. Configuració A

La mescla d'Argó i hidrogen s'injecta al recinte Ω_1 (segons la representació de la figura 5.2), en contacte amb la membrana de ferro, i difondrà a través de la membrana i el segment de plom-liti arribant al recinte Ω_2 . Com s'indica a la figura es pren com a sentit de difusió l'eix x d'esquerra a dreta.

El model de TMAP7 utilitzat per realitzar la simulació consta de dos volums o recintes funcionals i dos segments de difusió. Per a les tres configuracions s'ha utilitzat el mateix



model que es mostra en la figura 5.3. Per aquesta configuració l'espècie de difusió és hidrogen.

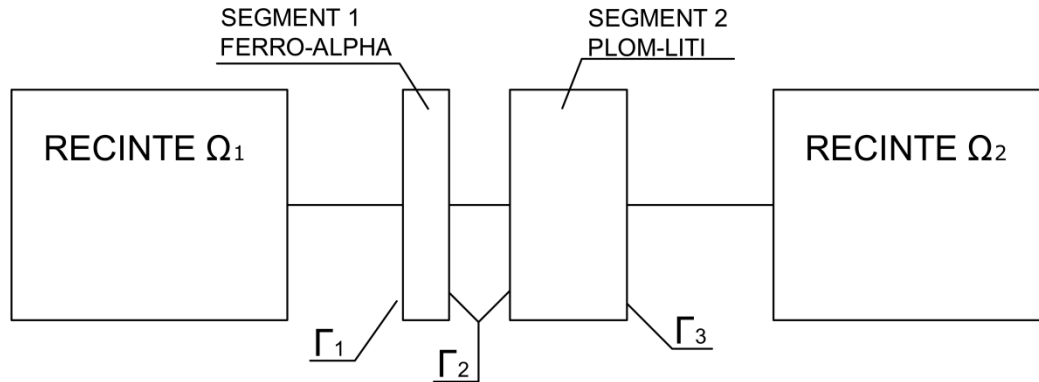


Figura 5.3. Modelització del dispositiu amb TMAP7

Els dos volums representen les dues cambres del dispositiu, mentre que els segments de difusió corresponen a la membrana de ferro i al plom-liti líquid.

Les condicions inicials de l'experiment i de la simulació són les següents:

- Temperatura constant en tot el dispositiu de 600°C.
- Pressió inicial a Ω_1 de 10^5 Pa.
- Pressió inicial a Ω_2 nul·la (s'imposen les condicions de buit).
- En el material (segments de difusió) la concentració inicial d' H_2 és zero.

Els segments de difusió es discretitzen mitjançant 50 nodes cadascun. La distància entre nodes és menor a les vores de les superfícies Γ_1 i Γ_3 , i major a la part central dels segments. D'aquesta forma la discretització és suficientment fina per tal que les equacions que modelitzen els fenòmens de superfície siguin convergents. Si la distància entre els nodes és massa gran es podrien donar problemes de convergència.

Les equacions que governen el sistema vindran donades per la llei de difusió i les condicions de contorn aplicades a cadascuna de les cares dels segments de difusió (Γ_1 , Γ_2 i Γ_3).

En aquest primer cas s'han realitzat dues simulacions diferents, on es varia la condició de contorn aplicada a la superfície de plom-liti en contacte amb el gas. En un dels casos s'aplica la condició de *ratedep* (equacions 4.1, 4.2), i en l'altre cas s'aplica la llei de Sievert o condició de contorn *lawdep* (equació 4.4).



D'aquesta forma es pot apreciar la sensibilitat del model respecte a la modelització dels fenòmens de superfície. A l'aplicar la llei de Sievert a la superfície Γ_3 s'imposa que el procés està en equilibri, mentre que en la dissociació-recombinació convencionals aquesta imposició no es compleix. Per tant, de la comparació entre els resultats obtinguts en cadascuna de les simulacions es podrà apreciar la sensibilitat del model respecte les condicions de contorn aplicades.

Per a la interfície entre metall i metall líquid (superfície Γ_2) s'aplicarà la llei de Sievert, ja que en les interfícies metall-líquid els fenòmens de superfície són suficientment propers a l'equilibri com per poder suposar que el procés està en equilibri.

Per a la interfície entre ferro i gas (superfície Γ_1) s'aplica la condició de contorn *ratedep* o dissociació-recombinació. En els processos de superfície metall-gas el procés no s'aproxima ràpidament a l'equilibri, de manera que no es pot aplicar la llei de Sievert.

Respecte la difusió dels àtoms d'hidrogen en el material s'aplica la segona llei de Fick (equació 4.12).

Les equacions de difusió del sistema són:

$$\frac{\partial C_{H,EU}}{\partial t} = D_{H,eu} \frac{\partial^2 C_{H,EU}}{\partial x^2} \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial C_{H,PbLi}}{\partial t} = D_{H,eu} \frac{\partial^2 C_{H,PbLi}}{\partial x^2} \quad (5.2)$$

Les condicions inicials i de contorn són les següents:

$$C_{H,EU}|_{t=0} = 0 \text{ at./m}^2$$

$$C_{H,PbLi}|_{t=0} = 0 \text{ at./m}^2$$

$x = 0 \text{ mm}$; superfície Γ_1

$$J_H = 2 J_{H_2} \quad (5.3)$$

$$J_{H_2} = k_{d,H_2} P_{H_2} - k_{r,H_2} C_H^2 \quad (5.4)$$

$x = 0.7 \text{ mm}$; superfície Γ_2

$$C_H = k_{s,H} P_{H_2}^{0.5} \quad (5.5)$$



$x = 10.7 \text{ mm}$; superfície Γ_3

$$J_H = 2 J_{H_2} \quad (5.6)$$

$$J_{H_2} = k_{d,H_2} P_{H_2} - k_{r,H_2} C_H^2 \quad (5.7)$$

} Cas *ratedep*

$$C_H = k_{s,H} P_{H_2}^{0.5} \quad (5.8)$$

Cas *lawdep*

A continuació es resumeix el valor de les constants empleades en la simulació (Annex A):

$$D_{H-EU} = 2.13 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$k_{d,H_2-EU} = 5.42 \cdot 10^{15} \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$D_{H-PbLi} = 9.28 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$k_{r,H_2-EU} = 1.91 \cdot 10^{-27} \text{ m}^4 \text{ s}^{-1}$$

$$k_{s,H-EU} = 1.68 \cdot 10^{21} \text{ at m}^{-3} \text{ Pa}^{-0.5}$$

$$k_{d,H_2-PbLi} = 1.36 \cdot 10^7 \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$k_{s,H-PbLi} = 9.24 \cdot 10^{16} \text{ at m}^{-3} \text{ Pa}^{-0.5}$$

$$k_{d,H_2-PbLi} = 1.59 \cdot 10^{-27} \text{ m}^4 \text{ s}^{-1}$$

5.1.2.2. Resultats

En la figura 5.4 es mostra el resultat de les dues simulacions esmentades. S'observa que en el cas d'aplicar la llei de Sievert en la interfície Γ_3 el procés de transferència de matèria és més ràpid, ja que s'imposa l'equilibri. Per tant, la concentració d'hidrogen al recinte Ω_2 augmenta més ràpidament arribant a valors més elevats que per al cas limitat per la recombinació.

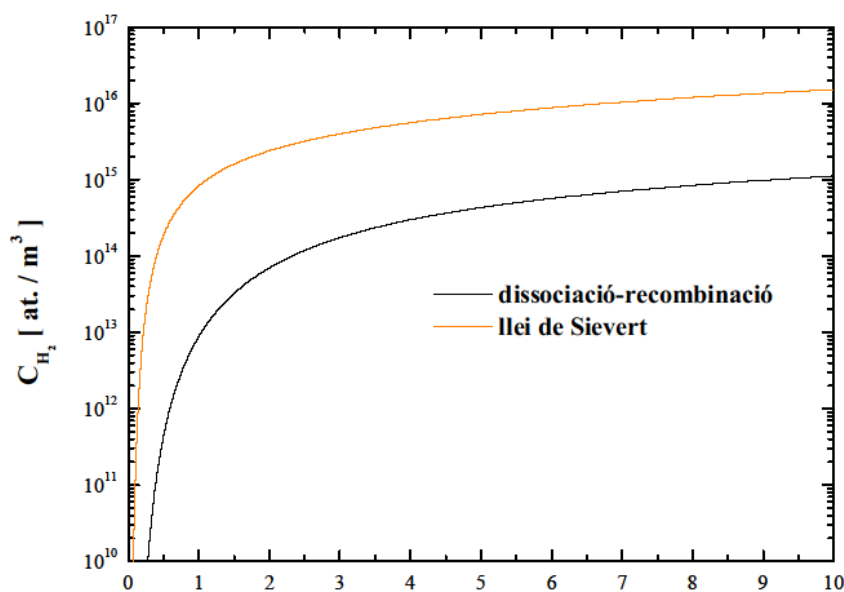


Figura 5.4. Evolució de la concentració d' H_2 al recinte Ω_2



En aquest cas, la diferència entre una i altra situació és força significativa, ja que els valors de concentració que s'obtenen en aplicar llei de Sievert són d'un ordre de magnitud major que per a la dissociació-recombinació convencionals. Per tant, en aquest cas, aplicar la llei de Sievert podria resultar una mala aproximació.

5.1.3. Configuració B

5.1.3.1. Descripció del model

La segona de les configuracions és essencialment igual a la configuració A, però en aquest cas l'espècie d'estudi és el deuteri. De manera que els recintes i segments de difusió seran els definits per a la configuració anterior.

Les condicions inicials són:

- Temperatura constant en tot el dispositiu de 700°C.
- Pressió inicial a Ω_1 de 10^5 Pa.
- Pressió inicial a Ω_2 nul·la (s'imposen les condicions del buit).
- En el material (segments de difusió) la concentració inicial de D_2 és zero.

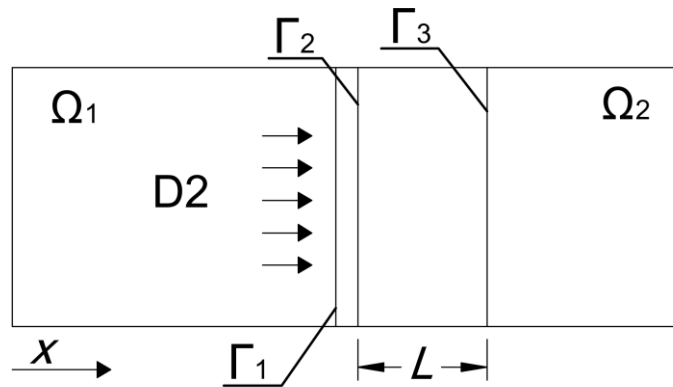


Figura 5.5. Configuració B

Com que es tracta d'un cas homòleg les equacions que governen el sistema seran les mateixes que en l'anterior simulació canviant l'espècie d'hidrogen a deuteri.

El valor de les constants emprades en la simulació és (Annex A):

$$\begin{aligned}
 D_{D-EU} &= 2.06 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} & k_{d,D_2-EU} &= 1.87 \cdot 10^{16} \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \\
 D_{D-PbLi} &= 1.07 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} & k_{r,D_2-EU} &= 4.29 \cdot 10^{-27} \text{ m}^4 \text{ s}^{-1}
 \end{aligned}$$



$$k_{s,D-EU} = 2.09 \cdot 10^{21} \text{ at m}^{-3} \text{ Pa}^{-0.5} \quad k_{d,D_2-PbLi} = 7.22 \cdot 10^7 \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$k_{s,D-PbLi} = 1.73 \cdot 10^{17} \text{ at m}^{-3} \text{ Pa}^{-0.5} \quad k_{r,D_2-PbLi} = 2.42 \cdot 10^{-27} \text{ m}^4 \text{ s}^{-1}$$

Per a aquesta configuració es realitzen dos estudis de sensibilitat: influència de la condició de contorn aplicada en la superfície de plom-liti en contacte amb el gas (Γ_3), i la influència de la longitud (L) de plom-liti en el sistema.

5.1.3.2. Resultats

En la figura 5.6 es mostra l'evolució temporal de la concentració de deuteri al recinte Ω_2 . Es pot observar que, com en el cas anterior, si s'aplica la llei de Sievert com a condició de contorn la concentració de deuteri final és més elevada que si s'aplica la condició de dissociació-recombinació.

En canvi, en aquest cas, en els instants inicials de la simulació la concentració al aplicar la llei de Sievert és menor que a l'aplicar dissociació-recombinació. Això és degut a que a mesura que transcorre el temps i la concentració de deuteri al recinte Ω_1 és menor, el flux d'àtoms de deuteri a la superfície Γ_1 serà cada vegada menor, cosa que no succeeix quan s'aplica la llei de Sievert.

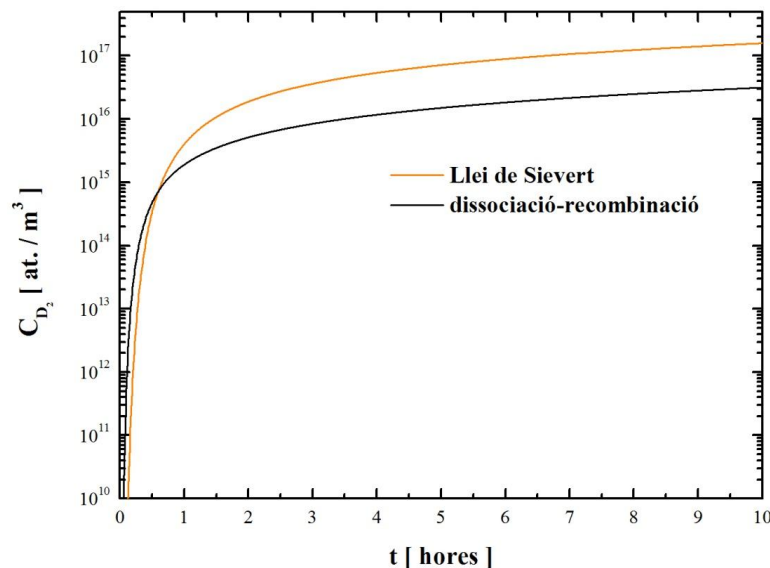


Figura 5.6. Evolució de la concentració de D_2 al recinte Ω_2



Cal destacar que els resultats obtinguts en la concentració són d'un ordre de magnitud superior ja que en aquest cas la temperatura és major, de manera que tot i tractar-se de deuteri, la solubilitat i la difusivitat seran majors.

Les constants de recombinació en el plom-liti es calculen mitjançant l'expressió: $k_s = (k_d/k_r)^{1/2}$. Els valors de la constant de solubilitat emprats són els obtinguts de l'experiment, essent la solubilitat del deuteri més gran que la de l'hidrogen. Aquest fet podria explicar que els resultats entre el cas que s'aplica llei de Sievert i el cas on hi ha dissociació-recombinació siguin tan diferents.

L'altre estudi de sensibilitat s'ha realitzat sobre la influència de la longitud del segment de plom-liti en l'evolució del sistema. Com és d'esperar, al augmentar la longitud de plom-liti, aleshores la longitud de difusió també ho farà. De manera que el temps de recorregut del deuteri serà major i, per tant, trigarà més en arribar al recinte Ω_2 . A la figura 5.7 s'observa com la concentració disminueix a mesura que s'augmenta la longitud del segment de plom-liti. Cal esmentar que la concentració en el gràfic està a escala logarítmica, de manera la disminució de la concentració és força accentuada.

Aquest estudi de sensibilitat es realitza emprant com a condició de contorn dissociació-recombinació (*ratedep*).

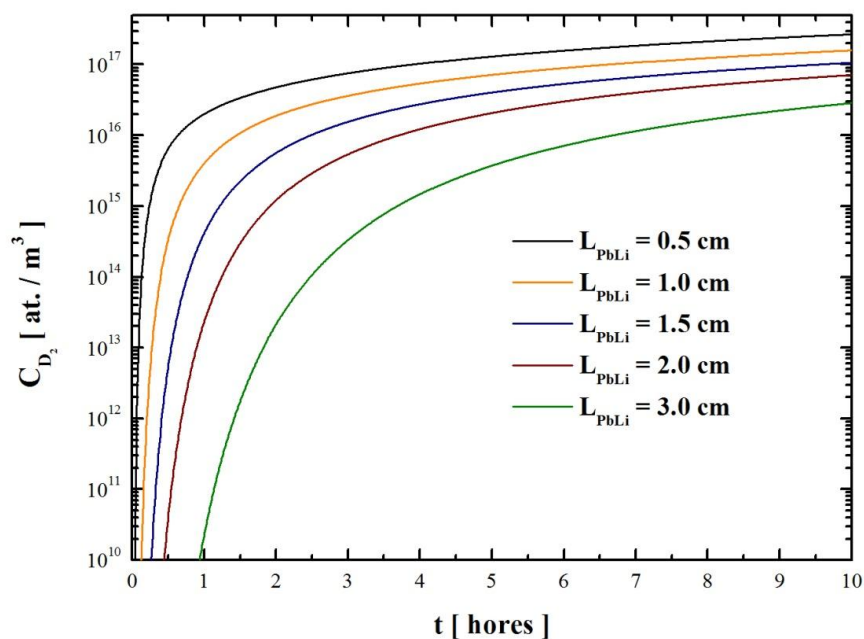


Figura 5.7. Evolució de la concentració de D_2 al recinte Ω_2 en funció de la longitud de plom-liti del sistema



5.1.4. Configuració C

5.1.4.1. Descripció del model

En la tercera i última de les configuracions es simula el procés d'intercanvi isotòpic que té lloc a l'injectar hidrogen a una de les cambres i deuteri a l'altra. Com en els casos anteriors el dispositiu és el mateix i, per tant, la geometria es manté.

Les condicions inicials de la simulació són les següents:

- Temperatura constant en tot el dispositiu de 700°C.
- Pressió inicial de D_2 al recinte Ω_1 i d' H_2 al recinte Ω_2 de 10^5 Pa.
- En el material (segments de difusió) la concentració inicial d' D_2 i H_2 és zero.

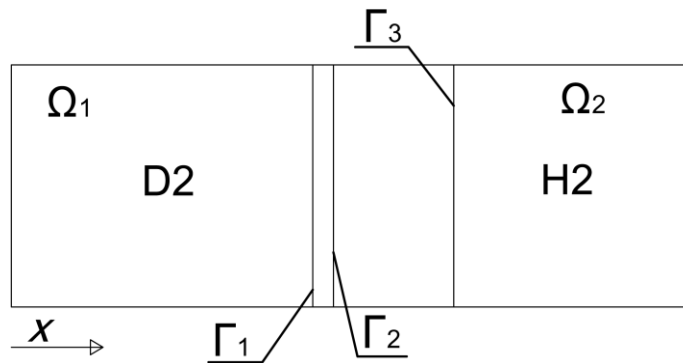


Figura 5.8. Configuració C

En aquest cas les equacions que governen el sistema varien sensiblement ja que en aquest cas hi ha dos espècies.

En referència a la difusió les equacions seran les mateixes per a ambdues espècies, variant únicament el coeficient de difusió en funció de l'espècie.

En canvi, les equacions que descriuen els fenòmens de superfície varien, ja que en aquest cas hi ha interacció entre els dos isòtops i es forma l'espècie molecular HD, heteronuclear. De manera que les expressions són:



$x = 0 \text{ mm}$; superfície Γ_1

$$J_H = 2J_{H_2} + J_{HD} \quad (5.9)$$

$$J_{H_2} = k_{d,H_2-EU} P_{H_2} - k_{r,H_2-EU} C_H^2 \quad (5.10)$$

$$J_{HD} = k_{d,HD-EU} P_{HD} - k_{r,HD-EU} C_H C_D \quad (5.11)$$

$$J_D = 2J_{D_2} + J_{HD} \quad (5.12)$$

$$J_{D_2} = k_{d,D_2-EU} P_{D_2} - k_{r,D_2-EU} C_D^2 \quad (5.13)$$

$x = 0.7 \text{ mm}$; superfície Γ_2

$$C_H = k_{s,H} P_{H_2}^{0.5} \quad (5.14)$$

$$C_D = k_{s,D} P_{D_2}^{0.5} \quad (5.15)$$

$$C_H C_D = k_{s,HD} P_{HD}^{0.5} \quad (5.16)$$

$x = 10.7 \text{ mm}$; superfície Γ_3

$$J_H = 2J_{H_2} + J_{HD} \quad (5.17)$$

$$J_{H_2} = k_{d,H_2-PbLi} P_{H_2} - k_{r,H_2-PbLi} C_H^2 \quad (5.18)$$

$$J_{HD} = k_{d,HD-PbLi} P_{HD} - k_{r,HD-PbLi} C_H C_D \quad (5.19)$$

$$J_D = 2J_{D_2} + J_{HD} \quad (5.20)$$

$$J_{D_2} = k_{d,D_2-PbLi} P_{D_2} - k_{r,D_2-PbLi} C_D^2 \quad (5.21)$$

Cas *ratedep*

$$C_H = k_{s,H} P_{H_2}^{0.5} \quad (5.22)$$

$$C_D = k_{s,D} P_{D_2}^{0.5} \quad (5.23)$$

$$C_H C_D = k_{s,HD} P_{HD}^{0.5} \quad (5.24)$$

Cas *lawdep*



El valor de les constants emprades es detalla a continuació (Apèndix A):

$$D_{H-EU} = 2.92 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$D_{D-EU} = 2.06 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$D_{H-PbLi} = 1.16 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$D_{D-PbLi} = 1.07 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$$

$$k_{s,H-EU} = 2.09 \cdot 10^{21} \text{ at m}^{-3} \text{ Pa}^{-0.5}$$

$$k_{s,D-EU} = 2.09 \cdot 10^{21} \text{ at m}^{-3} \text{ Pa}^{-0.5}$$

$$k_{s,H-PbLi} = 9.81 \cdot 10^{16} \text{ at m}^{-3} \text{ Pa}^{-0.5}$$

$$k_{s,D-PbLi} = 1.73 \cdot 10^{17} \text{ at m}^{-3} \text{ Pa}^{-0.5}$$

$$k_{d,H_2-EU} = 1.87 \cdot 10^{16} \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$k_{d,D_2-EU} = 1.87 \cdot 10^{16} \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$k_{r,H_2-EU} = 4.29 \cdot 10^{-27} \text{ m}^4 \text{ s}^{-1}$$

$$k_{r,D_2-EU} = 4.29 \cdot 10^{-27} \text{ m}^4 \text{ s}^{-1}$$

$$k_{d,H_2-PbLi} = 2.32 \cdot 10^7 \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$k_{d,D_2-PbLi} = 7.22 \cdot 10^7 \text{ Pa}^{-1} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$$

$$k_{r,H_2-PbLi} = 2.42 \cdot 10^{-27} \text{ m}^4 \text{ s}^{-1}$$

$$k_{r,D_2-PbLi} = 2.42 \cdot 10^{-27} \text{ m}^4 \text{ s}^{-1}$$

5.1.4.2. Resultats

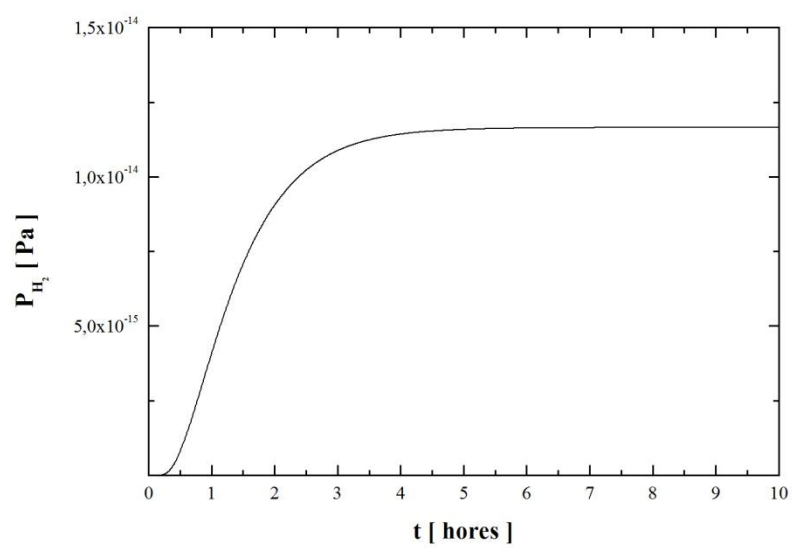
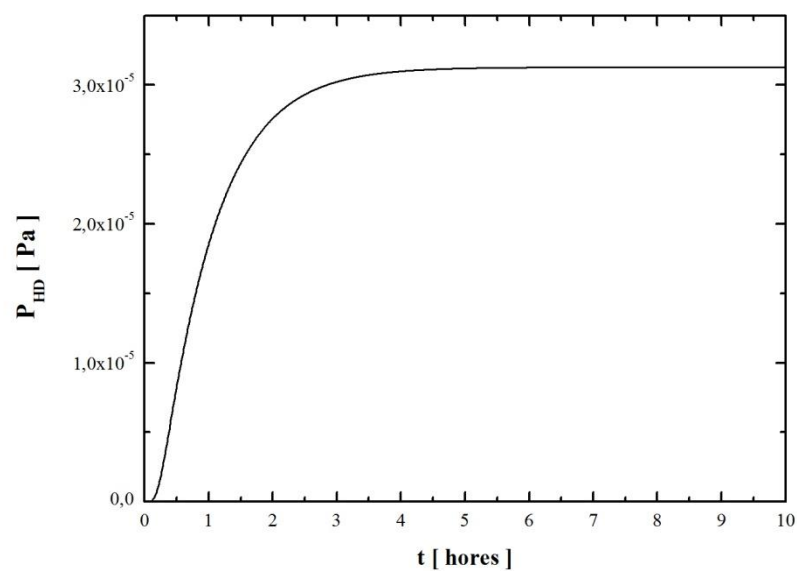
Per a aquesta última configuració no s'ha realitzat l'anàlisi de sensibilitat corresponent a la condició de contorn aplicada (Llei de Sievert o dissociació-recombinació) ja que en els casos anteriors queda clar la influència d'aplicar una o altra condició.

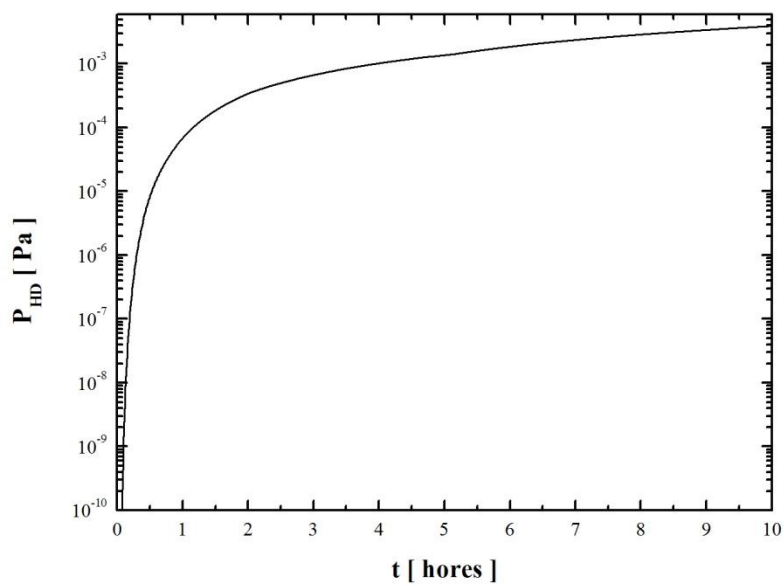
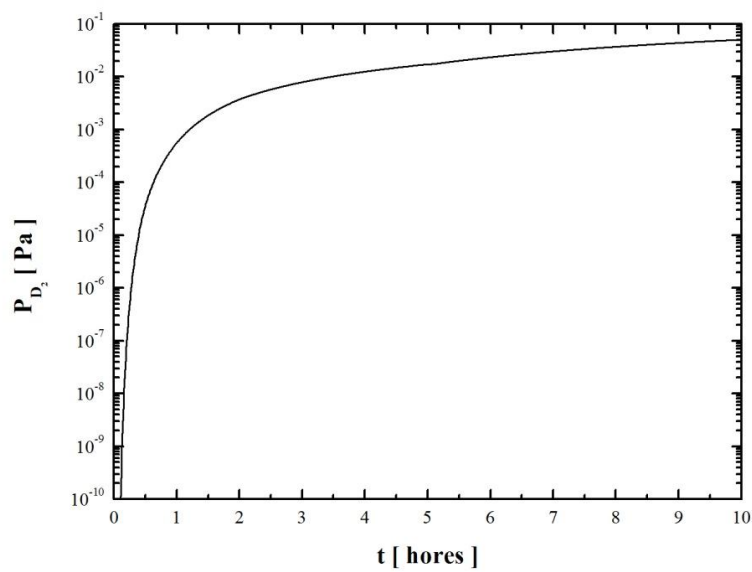
Les simulacions s'han realitzat aplicant la condició de dissociació-recombinació convencionals, ja que és el cas més limitant.

En canvi, sí que és realitza la comparació entre els casos amb una sola espècie i el procés d'intercanvi isotòpic.

En les figures 5.9, 5.10, 5.11, i 5.12 es mostra l'evolució de la concentració de les espècies moleculars H_2 i HD al recinte Ω_1 i l'evolució de la concentració de D_2 i HD al recinte Ω_2 .



Figura 5.9. Evolució de la concentració de H_2 al recinte Ω_1 del dispositiuFigura 5.10. Evolució de la concentració de HD al recinte Ω_1 del dispositiu

Figura 5.11. Evolució de la concentració de HD al recinte Ω_2 del dispositiuFigura 5.12. Evolució de la concentració de D_2 al recinte Ω_2 del dispositiu

En les gràfiques anteriors s'observa que la concentració de D_2 és més elevada que la concentració de HD. El flux de molècules de HD serà major que el flux de molècules de D_2 per a concentracions superficials d'H majors que de D. Això es compleix en els primers instants de la simulació. Transcorregut cert temps, la concentració de D a la superfície serà major que la concentració d'H. Per tant, el flux de D_2 cap al recinte serà major. A lesura que avança la simulació s'accentua aquesta diferència, per tant, la concentració de D_2 final serà major que la concentració de HD.

En la figura 5.13 es mostra la comparativa entre el cas sense intercanvi i el cas amb intercanvi. Com es pot observar el procés d'intercanvi isotòpic accelera el transport de deuteri, essent la concentració un ordre de magnitud major aproximadament.

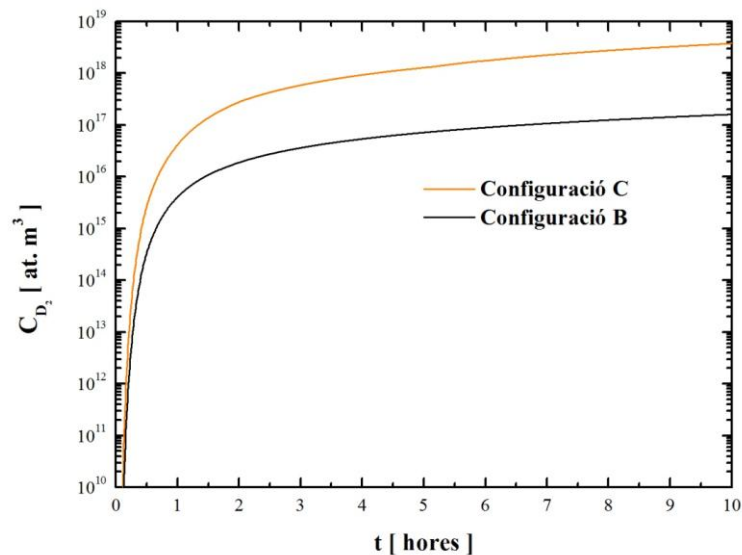


Figura 5.13. Comparació entre la configuració B i la configuració C

El procés de bescanvi isotòpic entre hidrogen i deuteri afecta al procés de permeació de la mateixa manera que ho faria un augment de la solubilitat del deuteri. Per tant, es podria dir que es produeix un augment en la solubilitat efectiva del deuteri. De manera que en cas que es vulgui augmentar la permeabilitat del deuteri i accelerar el procés es pot aconseguir introduint hidrogen al recinte Ω_2 .





5.2. CAS 2: CANAL DE PLOM-LITI HCLL

5.2.1. Definició del cas

En aquest segon cas es simula un canal de la unitat reproductora (BU) de l'HCLL previst per a ITER. Aquesta modelització és una bona eina de disseny.

Com s'ha comentat anteriorment, la unitat reproductora consta de dos circuits independents: el circuit de plom-liti i el circuit d'He. Mitjançant el circuit de plom-liti es genera el T que s'utilitzarà com a combustible en el reactor. Per altra banda, el circuit d'He és l'encarregat de refrigerar la unitat reproductora i extreure part del T generat que posteriorment serà separat pel Sistema d'Extracció de T per poder ser re-injectat al reactor.

En un canal de la BU hi circula el plom-liti a una velocitat aproximada de 1 mm/s, per tal de reduir la pèrdua de càrrega magneto-hidrodinàmica. Per les plaques superior i inferior que tanquen el canal hi circula heli a una velocitat inicial de 35.6 m/s. Aquesta velocitat és la utilitzada en el model per determinar el cabal d'heli entre recintes, tot i que degut a la pèrdua de pressió la velocitat de l'heli augmentarà al llarg del canal. El cabal d'heli és una restricció de disseny imposada per a poder mantenir la temperatura del material estructural per sota de la temperatura de seguretat, disminuint el degradament del material.

En el disseny que s'ha utilitzat com a referència [7], les dimensions d'una BU són de 750 mm en direcció radial, per 216 mm en les direccions poloidal i toroidal. Hi ha un total de 4 subcanals, separats per plaques refrigerants (CP) de 6,5 mm de gruix. La distància de separació entre CP és de 43.2 mm. A la figura 5.14 es mostra un exemple d'un possible esquema de refrigeració per a les plaques.

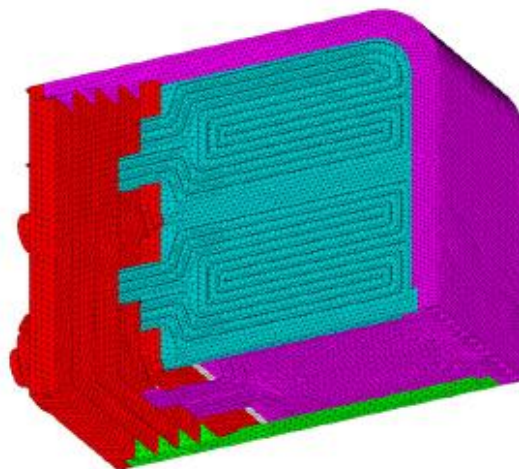


Figura 5.14. Exemple de distribució dels canal de refrigeració. Model FEM [20].



5.2.2. Descripció del model

En el model que es presenta es simula un dels subcanals d'entrada i sortida de la BU (separat per un CP), per tal de poder simular el moviment del plom-liti cap a la primera paret (FW) i la tornada. Aprofitant la simetria existent en la direcció poloïdal, es modela tan sols la meitat de cada canal.

El model implementat per aquest cas presenta dues grans diferències a destacar respecte als models anteriors: la modelització de fluids en moviment i la introducció de termes font per a la generació de l'espècie de difusió.

Els fluids en moviment en aquest cas són tan el plom-liti com l'heli. Com ja s'ha indicat anteriorment, TMA7 és un programa 1D, de manera que està programat per a simulacions de transport de matèria en una única direcció. Per tant, modelitzar un sistema amb fluids en moviment presenta una dificultat afegida.

En el model que es presenta es simula el moviment de plom-liti i d'heli encadenant recintes funcionals (de gas) i imposant un valor de flux volumètric entre ells. De manera que tots els recintes de plom-liti estan connectats entre si mitjançant un flux volumètric de $4.49 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$. El valor del flux s'obté multiplicant la secció de mig canal de plom-liti per la velocitat del fluid.

Els recintes d'heli es connecten anàlogament, sent el flux volumètric de $7.88 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$.

Per altra banda, per tal de considerar els efectes que tindrà la capa límit entre el plom-liti i la placa d'Eurofer es considera un segment de difusió de plom-liti. Aquest segment modelitza la resistència difusiva deguda a la capa límit hidrodinàmica del plom-liti.

Actualment no hi ha bibliografia relativa al comportament del plom-liti en moviment en contacte amb un metall, de manera que es realitzen dues hipòtesis al respecte: a la primera se suposa que el plom-liti es comporta com un fluid que segueix la fórmula de Blasius, a la segona que es comporta com el mercuri (correlació molt utilitzada per a metalls líquids).

Suposant que el plom-liti segueix la fórmula de Blasius es troba un valor de $\delta=1.35 \text{ mm}$. Aquest valor serà la longitud del segment de difusió. Si es considera que el plom-liti es comporta com ho fa el mercuri, es té un valor $\delta=1.69 \text{ mm}$.

La correlació de Blasius per a un flux laminar és:



$$\frac{\delta}{L} = \frac{1}{\sqrt{Re}} \quad (5.25)$$

On $Re = 30.86$ i $L = 0.75$ m (la longitud del canal)

Es troba, doncs, un valor de $\delta=1.35$ mm.

La correlació per al mercuri és:

$$Sh = 0.096Re^{0.913}Sc^{0.346} \quad (5.26)$$

Sabent que:

$$Sh = \frac{kL}{D} \quad (5.27)$$

On:

$$k = \frac{\delta}{D} \quad (5.28)$$

Es troba el valor $\delta=1.69$ mm

A la figura 5.15 es poden observar els canals del model i el moviment de plom-liti.

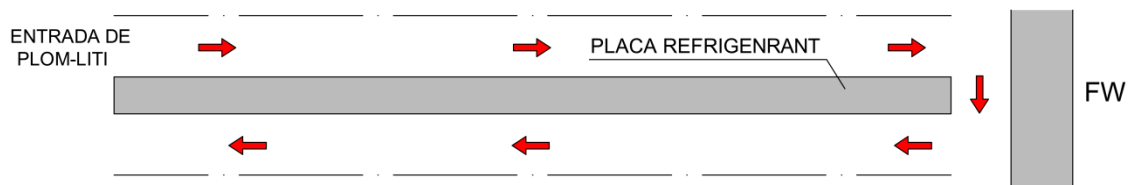


Figura 5.15. Moviment de plom-liti en els canals de la BU

Per altra banda, la generació de triti al llarg del canal es modela mitjançant recintes frontera que estaran connectats als recintes funcionals de plom-liti. Els recintes frontera permeten fixar unes condicions constants de pressió parcial de les espècies i temperatura. De manera que fixant un flux volumètric d'aportació des dels recintes frontera al recintes funcionals s'aconsegueix simular la generació de triti que té lloc al canal.

L'expressió de generació de triti al llarg del canal es la següent [19]:

$$S_T = 5.585 \cdot 10^{18} e^{-3.21x} [at. s^{-1}m^{-3}] \quad (5.29)$$

Amb $x=0$ en la FW.



Integrant l'equació 5.25 en els tres trams que s'ha dividit el canal es s'obté la generació de triti per cada tram. De manera que:

$$\int_0^{0.25} S_T dx = 1.08 \cdot 10^{15} \text{ at. s}^{-1}$$

$$\int_{0.25}^{0.5} S_T dx = 5.30 \cdot 10^{14} \text{ at. s}^{-1}$$

$$\int_{0.5}^{0.75} S_T dx = 2.17 \cdot 10^{14} \text{ at. s}^{-1}$$

Els valor anteriors s'han de dividir entre dos ja que al recinte funcional s'han de generar molècules de T_2 per tal de poder connectar-lo al segment de difusió. Des dels recintes frontera es fixa un valor de flux volumètric, de tal manera que imposant els valors de pressió parcial adequats a cada recinte s'aconsegueix simular la generació de triti en el canal.

La condició de contorn aplicada a la superfície de plom-liti en contacte amb el recinte és la condició de *lawdep*. Tanmateix, com que entre el recinte i el segment no hi hauria d'haver cap resistència, el valor de la constant de solubilitat és el valor del factor de conversió entre pressió parcial en el recinte i concentració a la superfície del segment. De manera que l'expressió que governa el fenomen de superfície és:

$$C_T = 2.03 \cdot 10^{27} P_{T_2} \quad (5.30)$$

En la superfície en contacte entre la placa d'Eurofer i l'heli s'aplica la condició de dissociació-recombinació.

El model de TMAP7 està format per 9 recintes funcionals, que representen els volums de plom-liti (6 recintes) d'heli (3 recintes). Cada canal de la BU es divideix en 3 parts iguals, de manera que 3 recintes de plom-liti corresponen al canal d'anada i tres al canal de tornada.

En referència als segments de difusió n'hi ha un total de 12, formant 6 grups amb un segment de plom-liti i un d'Eurofer cadascun. Cada un dels grups de dos segments es connecta a un recinte de plom-liti. A cada recinte d'heli s'hi connecten dos grups de segments de difusió (un del canal d'anada i un del canal de tornada). A la figura 5.16 es mostra l'esquema del model.



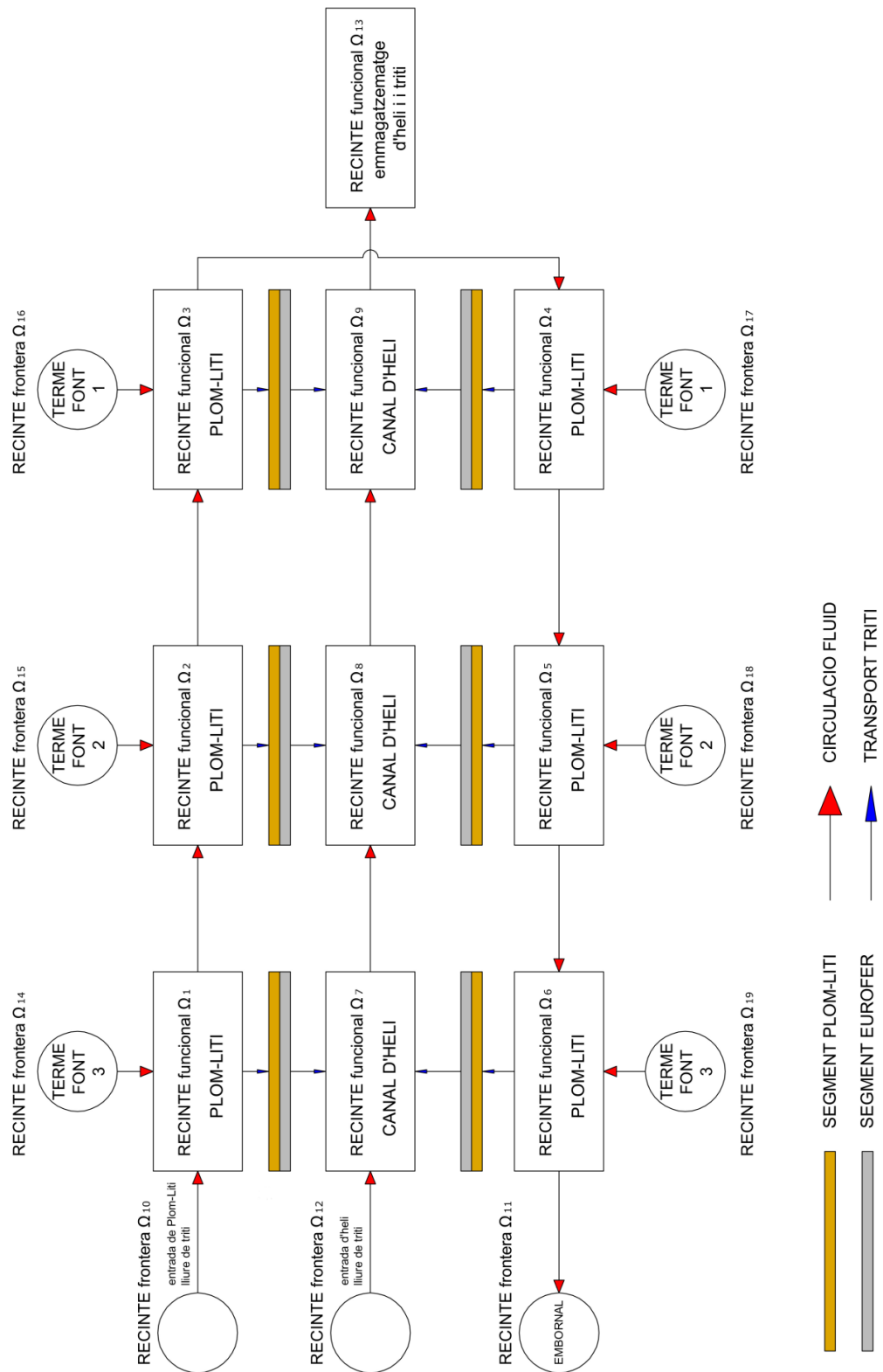


Figura 5.16. Esquema Model TMAP7



5.2.3. Resultats

De la simulació del model anterior se'n pot extreure molta informació relativa al comportament del T en el canal i els diferents fenòmens que s'hi produeixen, així com del comportament del codi. Com s'ha comentat anteriorment, del model es realitzen dues simulacions diferents variant el gruix del segment de plom-liti en funció del comportament del fluid. Si se suposa que el règim és laminar, aquesta longitud es de 1.35 mm. Mentre que si se suposa que el fluid es comporta com el mercuri, la longitud de plom-liti serà de 1.69 mm. Com es veurà al llarg d'aquest capítol aquesta variació no suposa un canvi significatiu en el comportament del sistema, però sí que comporta una sensible variació en la quantitat total de triti extret pel circuit d'heli.

En les figures 5.17 i 5.18 es mostra la concentració de triti molecular al llarg del canal. Com es pot observar, els recintes on la concentració és menor són els recintes d'entrada al canal (recintes 1 i 2). Aquest és un resultat lògic, ja que el plom-liti entra a la BU lliure de triti. A més a més, es tracta de la zona on la generació és menor, ja que és la part del canal més allunyada de la FW.

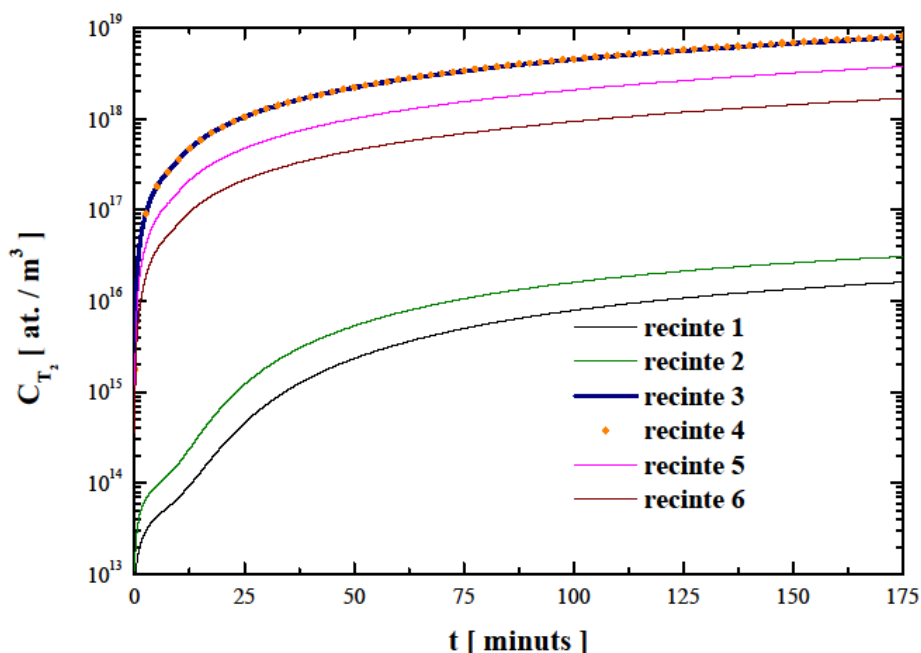


Figura 5.17. Concentració de T_2 als diferents recintes de plom-liti amb $\delta_{\text{pbLi}}=1.35$ mm



Els recintes on la concentració és major són els que estan en contacte amb la FW (recintes 3 i 4), on la generació de triti és més elevada. Al recinte següent (recinte 5), la concentració disminueix de la mateixa forma que ho fa en l'últim (recinte 6). Tot i que a aquests recintes hi arriba flux a una concentració més elevada, la generació no és suficient com per contrarestar la migració de triti cap a l'heli. Per tant, la concentració del recinte disminuirà respecte l'anterior.

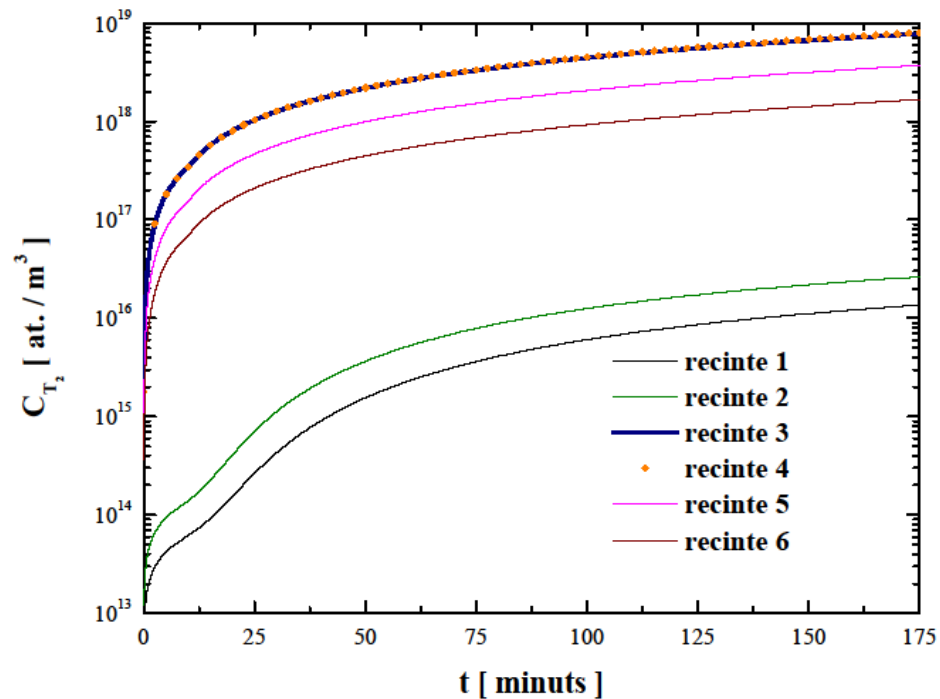


Figura 5.18. Concentració de T_2 als diferents recintes de plom-liti amb $\delta_{PbLi}=1.69$ mm

Com es pot observar, la variació en el resultat entre les dues simulacions no es pot apreciar gràficament. En la figura 5.19 es mostra l'error relatiu percentual que hi ha entre els dos casos. Només es grafiquen els recintes 1 i 2 ja que són els únics que presenten valors significatius. Per a la resta de recintes l'error relatiu no supera en cap cas el 3.5%.



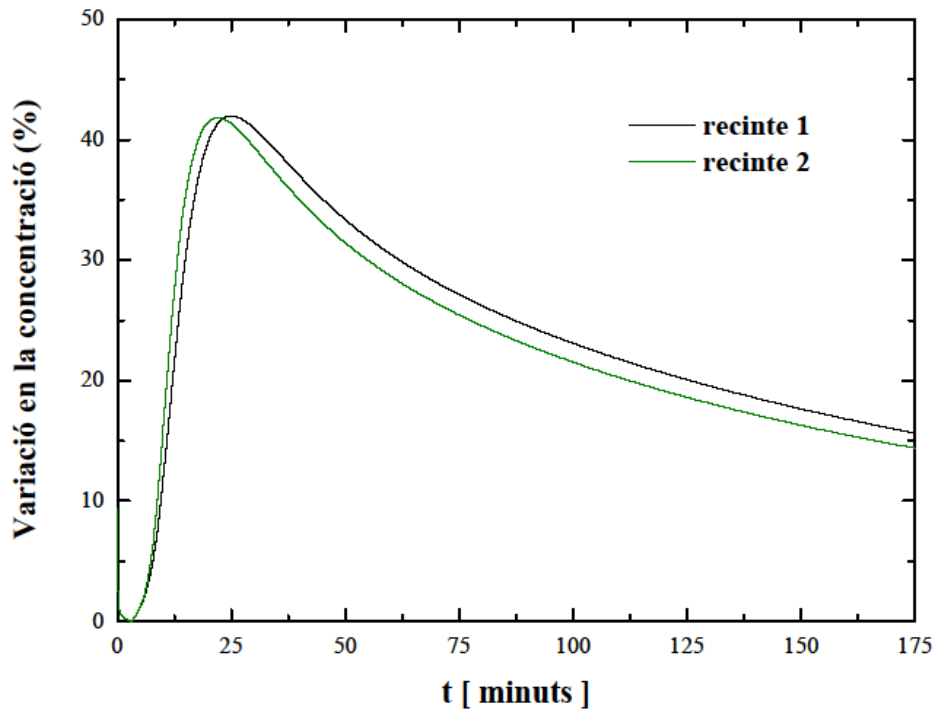


Figura 5.19. Variació percentual entre les dues simulacions per als recintes 1 i 2

Un altre aspecte que cal destacar és que es pot observar l'efecte del fenomen de “back permeation”, observat experimentalment [18] en permeadors d'hidrogen.

El flux de permeació entre dos recintes ve donat per l'expressió:

$$J = k_s(C_1 - kC_2) \quad (5.27)$$

On 1 és el recinte amb concentració inicial diferent de zero i 2 el recinte d'extracció (amb concentració inicial zero).

De l'equació 5.27 es dedueix que perquè el flux d'àtoms sigui de 1 cap a 2 s'ha de complir:

$$C_1 > kC_2 \quad (5.28)$$

Si aquesta condició no es compleix, essent $kC_2 > C_1$, aleshores el flux anirà de 2 a 1. És en aquesta situació quan es parla de “back permeation”, ja que apareix un flux de retorn des del canal d'extracció.



Aquest efecte es posa de manifest en els recintes 1 i 2, variant la forma de la corba de concentració de T_2 en els recintes. En la figura 5.20 es mostra el flux de retorn integrat des de l'heli cap al plom-liti.

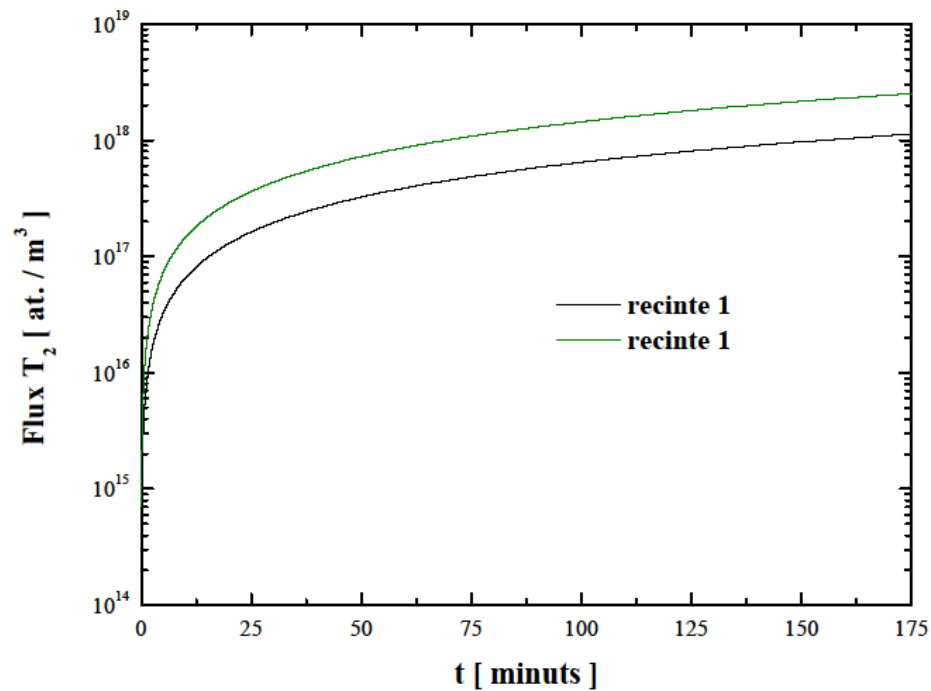


Figura 5.20. Flux de retorn des de la superfície als recintes 1 i 2

En les figures 5.21 i 5.22 es mostra la concentració de triti molecular al llarg del canal de refrigeració. Com es pot observar, la concentració augmenta a mesura que s'avança pel canal, arribant al punt de concentració màxima en el recinte de sortida de l'heli. Aquest resultat és l'esperat ja que l'heli entra al CP lliure de triti. Al llarg del recorregut el triti generat en el canal de plom-liti premearà cap a l'heli, augmentant progressivament la quantitat de molècules de triti al gas.



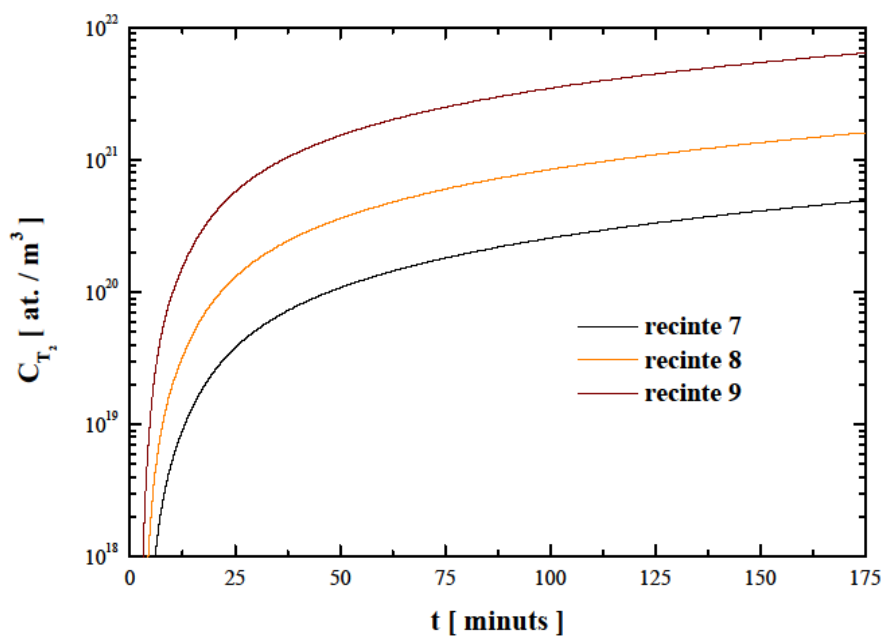


Figura 5.21. Concentració de T_2 als diferents recintes d'heli amb $\delta_{PbLi} = 1.35$ mm

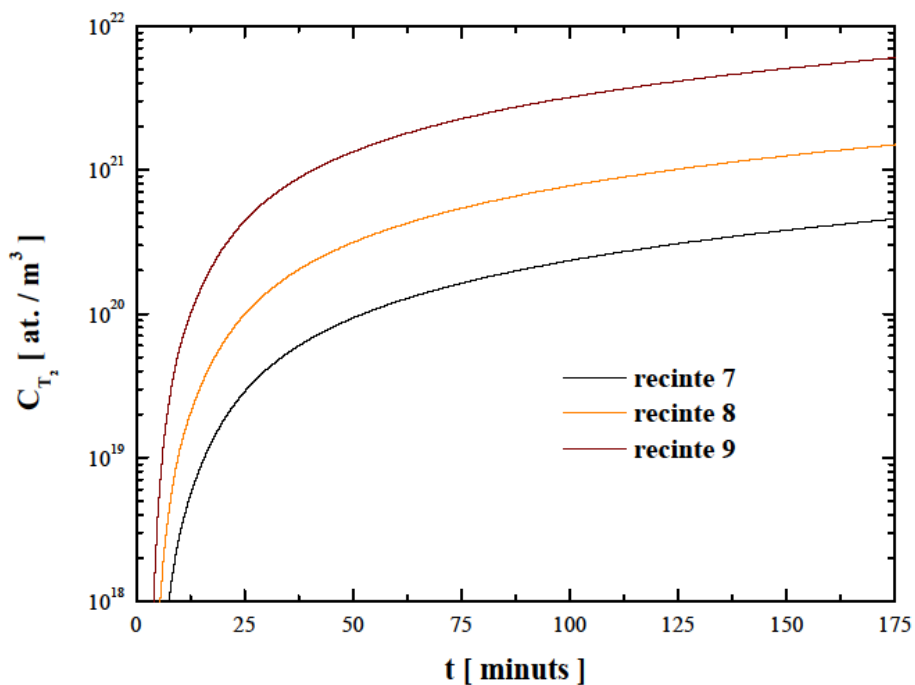


Figura 5.22. Concentració de T_2 als diferents recintes d'heli amb $\delta_{PbLi} = 1.69$ mm



Com en el cas anterior, gràficament no es pot apreciar una diferència significativa entre els dues simulacions. En la figura 5.23 es mostra la variació percentual entre el dos casos.

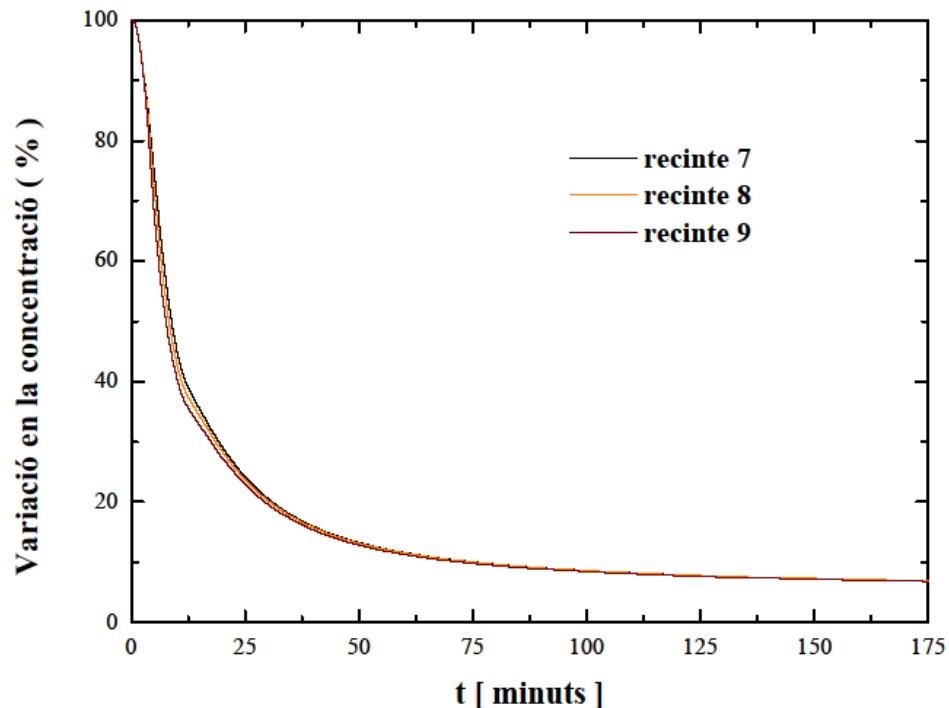


Figura 5.23. Variació percentual entre les dues simulacions per als recintes 7, 8 i 9

Cal destacar que aquesta variació és força significativa en els primers instants de simulació, però disminueix ràpidament arribant a valors per sota del 20% a partir dels 25 minuts.

La previsió d'operació per a ITER és realitzar polsos de 3000 segons. Les simulacions realitzades són per a temps més elevats per comprovar si el sistema arribava a un estat estacionari. S'ha vist que per a un temps de 3 hores el sistema no arriba a l'estat estacionari.

Per a realitzar el balanç de massa, els valors de concentració s'integren fins a $t=3000$ s. D'aquesta forma serà possible determinar l'eficiència de permeació en un pols d'operació.

La quantitat total de triti que s'extreu per al cas amb $\delta_{\text{PbLi}}=1.35$ mm és de $2.05 \cdot 10^{17}$ molècules de triti.

Per al cas amb $\delta_{\text{PbLi}}=1.69$ mm el valor és de $1.67 \cdot 10^{17}$ molècules de triti.



Amb els valors de generació que s'han proporcionat anteriorment es té que la quantitat total de triti molecular que s'ha generat al plom-liti al llarg dels 3000 segons de simulació és de $5.47 \cdot 10^{18}$ molècules.

Per tant, si es considera que el plom-liti es comporta seguint la correlació de Blasius, l'eficiència de permeació del canal és del 3.75%.

En canvi, si es considera que el plom-liti segueix la correlació del mercuri, l'eficiència de permeació del canal és del 3.05%.

En les simulacions realitzades amb els models presentats en aquest capítol es poden observar alguns fenòmens interessants relatius al comportament del T en el sistema.

En referència al canal de plom-liti, cal remarcar que es pot observar existeix un flux de retorn a l'inici del canal, on la generació de T és menor. També es pot observar com la concentració no augmenta al llarg de tot el canal, sinó que arribar a un punt màxim (en la zona més propera a la FW) i després disminueix. Això significa que al final del recorregut la generació de T és menor que la permeació cap a l'heli.

Per altra banda, en el canal d'heli la concentració augmenta al llarg del recorregut.

Finalment, en relació amb l'eficiència de permeació del canal cal destacar que s'ha obtingut un valor força baix que podria entrar dins el límits de disseny de la BU, ja que es pretén que la concentració de T en l'heli sigui la menor possible.



6. PRESSUPOST

El projecte desenvolupat es tracta d'un projecte d'investigació. Els mitjans necessaris per a poder dur-lo a terme són la llicència del software emprat i un ordinador per a poder realitzar les simulacions.

El projecte forma part dels projectes de desenvolupament d'eines numèriques per a la simulació que es duu a terme per part del Grup d'Estudis Termohidràulics de la Secció d'Enginyeria Nuclear. El material informàtic requerit per a la realització del projecte ha estat aportat pel Grup d'Estudis Termohidràulics de la Secció d'Enginyeria Nuclear. Com es tracta de material ja existent no es comptabilitzen els seus costos.

La llicència del software utilitzat en les simulacions ha estat cedida pel Ciemat.

De manera que l'únic cost que s'ha de comptabilitzar és el cost de contractar al personal que realitzi el projecte. Per aquest projecte s'ha estimat un total de 720 hores de feina a un sou net de becari de 8 €/h.

Descripció	Preu unitari (€/h)	Nº hores	Total (€)
Hores realització estudi	8	720	5760
IRPF (2%)			118
			5878





7. ESTUDI D'IMPACTE AMBIENTAL

En els reactors de fusió, el control de l'inventari de triti és una de les claus de la seguretat. El triti és un núclid radioactiu amb una gran capacitat de permeació i que per la seva naturalesa química pot incorporar-se al cicle de l'aigua. És per aquest motiu que es tracta d'un contaminant força perillós.

En el disseny de reactors de fusió, la concentració de triti en els diferents sistemes del reactor és una variable restrictiva de disseny. És per això, que el desenvolupament de models com el que es presenta en aquest projecte és una eina molt útil a l'hora de realitzar estudis d'impacte ambiental.

El model que s'ha desenvolupat integra únicament un component de tot el circuit de triti en el reactor, degut a les limitacions del codi i l'abast del projecte. A més a més, el model de HCLL implementat no ha estat validat contra resultats experimentals i tampoc analítics, de manera que els resultats obtinguts s'han d'interpretar de forma qualitativa i no pas de forma quantitativa, tot i que són de l'ordre de magnitud d'altres estudis realitzats.

Per les raons esmentades, la quantificació de les emissions de triti d'una planta de fusió nuclear queda totalment fora de l'abast d'aquest projecte.

A la figura 7.1 es mostra un diagrama de fluxos de triti en el circuit d'un reactor nuclear.

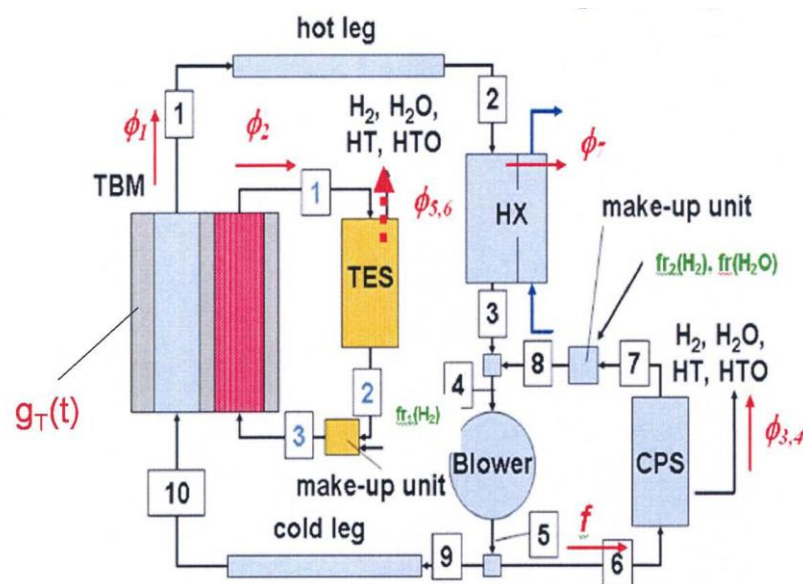


Figura 7.1. Diagrama de fluxos al circuit de triti d'un reactor de fusió. Font: Ciemat.





8. Conclusions

El model del transport de triti en un canal de l'embolcall tritigeni TBM-HCLL que s'ha desenvolupat ajuda a millorar la comprensió del comportament del codi i permet observar fenòmens d'interès que tenen lloc en el canal.

El model implementat pot servir com a base per a desenvolupar altres models més complexos del HCLL o sistemes similars del circuit de triti d'un reactor de fusió, inclosos alguns dels sistemes d'extracció de triti dissenyats.

En les simulacions realitzades amb els models desenvolupats en aquest projecte es poden observar alguns fenòmens interessants i amb un possible impacte sobre el disseny relatiu al comportament del T en el sistema.

Les simulacions realitzades per al HCLL, mostren que la concentració de triti al llarg del recorregut evoluciona de forma variable. Inicialment, el plom-liti entra lliure de triti i la concentració augmenta fins arribar a la zona propera a la primera paret, on arriba a un màxim de concentració. A partir d'aquest punt la generació en el si del metall líquid és menor que la permeació, de manera que la concentració disminuirà progressivament. Aquest és un fet important de cara a l'avaluació de l'inventari de triti.

Referent al canal de plom-liti és possible observar l'aparició del fenomen de "back permeation", fenomen àmpliament conegut i estudiat en permeadors catalítics per a l'obtenció d'hidrogen com a combustible. A l'inici del canal de plom-liti s'observa un flux de retorn des de l'heli cap al metall líquid, degut a que la concentració de triti a l'heli arriba a un valor suficientment elevat en comparació amb la concentració en el plom-liti. Aquest efecte pot tenir un elevat impacte en la quantitat de triti permeat pel sistema, amb les subseqüents conseqüències des del punt de vista de la seguretat.

Finalment, s'ha trobat que l'eficiència de permeació de triti és de 3.75% en el primer cas (règim laminar), i de 3.05% en el segon (correlació del mercuri). Aquests valors estan d'acord amb d'altres simulacions realitzades.

Durant el desenvolupament del model, s'ha trobat que el Codi TMAP7 presenta limitacions importants a l'hora de simular sistemes complexos com és un TBM-HCLL. Al tractar-se d'un codi 1D modelar el moviment de fluids representa una dificultat afegida. A més a més, en el cas que es modela, els efectes magneto-hidràulics sobre el plom-liti creen uns perfils de velocitats l'efecte dels quals no ha estat estudiat en profunditat; no existeixen correlacions



publicades que tinguin en compte aquest tipus de fenomen. Per tant, els resultats que s'obtenen s'han de interpretar des d'un punt de vista qualitatiu.

Aquest projecte pretén posar les bases per a futurs desenvolupaments amb el Codi TMAP7. Els resultats obtinguts en les simulacions realitzades estan d'acord amb la literatura publicada i són un bon punt de partida per arribar a un model completament fiable que permeti obtenir resultats quantitativament correctes.



Agraïments

En aquest apartat vull destacar la inestimable col·laboració dels directors del projecte, Lluís Batet i Jordi Fradera, destacant aquest últim per la seva atenció constant.

Vull agrair també el suport donat pel Grup d'Estudis Termohidràulics de la Secció d'Enginyeria Nuclear que m'ha permès utilitzar les seves instal·lacions. També cal agrair als desenvolupadors del Codi TMAP7 (INL) la feina realitzada en posar a punt el codi.

Aquest projecte ha estat possible gràcies al projecte Consolidar Tecnofus i a la inestimable col·laboració del Ciemat.

Finalment, vull agrair al Consejo de Seguridad Nuclear i a la Càtedra Argos el suport econòmic que ha representat la beca concedida en la segona convocatòria de l'any 2010.





Bibliografia

- [1] G. Rampal, D. Gatelet, *Design approach for the main ITER test blanket modules for the EU helium cooled lithium-lead blankets*, Fusion Engineering and Design Vol. 81 (2006) 695-700.
- [2] A. Aiello, J. Ricapito, *Tritium management in HCLL-PPCS model AB blanket*, Fusion Engineering and Design Vol. 82 (2007) 2195-2203.
- [3] J.-F. Salavy, G. Aiello, *The HCLL Test Blanket Module System: Present reference design, system integration in ITER and R&D needs*, Fusion Engineering and Design Vol. 83 (2008) 1157-1162.
- [4] O. Gastaldi, N. Ghinelli, *Tritium transfers and main operating parameters impact for demo lithium lead breeding blanket (HCLL)*, Fusion Engineering and Design Vol. 83 (2008) 1340-1347.
- [5] L. A. Sedano, *Tritium Cycle Design for the He-cooled Blankets for DEMO*, 1110 Informes Técnicos Ciemat, Ciemat 2007.
- [6] G. R. Longhurst, *TMAP7 User Manual*, INEEL/EXT-04-02352 Rev.1 2006.
- [7] J. Ambrosek, G.R Longhurst, *Verification and Validation of TMAP7*, INEEL/EXT-04-01657 (2004).
- [8] Ch. Girald, *8th IAEA Technical Meeting on Fusion Power Plant Safety*, Caradache.
- [9] Y. Poitevin, M. Zmitko, I. Ricapito, *HCLL Test Blanket Module Test program in ITER*, International Workshop on Liquid Metals Breeder Blankets, Fusion for Energy 2010.
- [10] R. A. Enderl, D. F. Holland, G. R. Longhurst, *Hydrogen transport behavior of metal coatings for plasma-facing components*, Journal of Nuclear Materials 176&177 (1990) 683-689.
- [11] M. I. Baskes, *A Calculation of the surface recombination rate constant for hydrogen isotopes on metals*, Journal of Nuclear Materials 92 (1980) 318-324.
- [12] H. Küchle, *Materials Database for Fusion Reactors Materials* (1987)



- [13] Pisarev, *Formation of HD molecules during desorption of deuterium from solids*, Journal of Nuclear Materials 258-263 (1998) 1138-1142.
- [14] T. Kiriya, T. Tanabe, *Interaction of H atoms with metals*, Journal of Nuclear Materials 220-222 (1995) 873-877.
- [15] A. Aiello, G. Benamati, *Hydrogen permeation through tritium permeation barrier in Pb-17Li*, Fusion Engineering and Design 58 (2001) 737-742.
- [16] G. A. Esteban, *Hydrogen transport and trapping in EUROFER 97'*, Journal of Nuclear Materials 367-370 (2007) 473-477.
- [17] F. Reiter, *Solubility and diffusivity of hydrogen isotopes in liquid Pb-17Li*, Fusion Engineering and Design 14 (1991) 207-211.
- [18] Chang-Yeol Yu, Dong-Wook Lee, *Study on a catalytic membrane reactor for hydrogen production from ethanol steam reforming*, International Journal of Hydrogen Energy 34 (2009) 2947-2954.
- [19] F. Gabriel, Y. Escuriol, F. Dabbene, O. Gastaldi, J. F. Salavy, *A 2D finite element modelling of tritium permeation for the HCLL DEMO blanket module*, Fusion Engineering and Design, Vol. 82 (2007) 2204-2211.
- [20] A. Aiello, F. Gabriel, G. Rampal, J.-F. Salavy, *A new cooling scheme for HCLL TBM*, Fusion Engineering and Design, Vol. 84 (2009) 390-393.

